

MECCANICA QUANTISTICA E MECCANICA STATISTICA
A.A. 2021/2022 – Prof. C. Presilla
Prova A5 – 7 settembre 2022

Cognome	
Nome	
Matricola	

penalità									
----------	--	--	--	--	--	--	--	--	--

esercizio	1	2	3	4	5	6
voto						

1 Siano $\mathbf{x} = (x_1, x_2, x_3)$, $\mathbf{p} = (p_1, p_2, p_3)$ e $\mathbf{L} = (L_1, L_2, L_3)$ gli operatori posizione, quantità di moto e momento della quantità di moto di una particella che si muove in tre dimensioni. Calcolare i commutatori $[L_i, x_j]$ e $[L_i, p_j]$ con $i, j = 1, 2, 3$.

_____ [punteggio 4]

2 Una particella si muove nello spazio tridimensionale con quantità di moto esattamente definita \mathbf{p} . Quale risultato si ottiene misurando L_p , la componente del suo momento angolare orbitale \mathbf{L} nella direzione di \mathbf{p} ?

_____ [punteggio 4]

3 Un sistema di particelle descritto dall'operatore matrice densità ρ è composto da due sottosistemi 1 e 2. Definire l'operatore matrice densità ridotta ρ_1 del sottosistema 1. Senza dimostrarlo, che cosa possiamo sicuramente dire circa le proprietà di ρ_1 indipendentemente dalla natura di ρ ?

_____ [punteggio 4]

4 Per una particella di massa m vincolata nel segmento $[-a, a]$ (buca di potenziale infinitamente profonda di larghezza $2a$) possiamo supporre che lo stato fondamentale sia ben approssimato dalla funzione d'onda (non normalizzata)

$$\psi(x; \gamma) = |x|^\gamma - a^\gamma,$$

con γ parametro variazionale reale. Determinare:

- 1) il segno di γ per cui $\psi(x; \gamma)$ può effettivamente rappresentare la funzione d'onda dello stato fondamentale del problema;
 - 2) l'energia media della particella nello stato $\psi(x; \gamma)$;
 - 3) la migliore stima possibile all'energia E_0 dello stato fondamentale ottenuta al variare di γ ;
 - 4) l'errore relativo commesso utilizzando l'energia trovata al punto 3) invece di quella esatta.
- Si osservi che $\psi(x; \gamma)$ e la sua derivata seconda sono funzioni pari.

[punteggio 7]

5 Due particelle di massa m_1 e m_2 e spin $1/2$ sono vincolate a muoversi lungo una retta interagendo mediante il potenziale

$$V(x_1, \mathbf{s}_1, x_2, \mathbf{s}_2) = \frac{1}{2}k(x_1 - x_2)^2 + a\mathbf{s}_1 \cdot \mathbf{s}_2,$$

dove x_1, x_2 indicano le posizioni delle due particelle lungo la retta e $\mathbf{s}_1, \mathbf{s}_2$ i loro spin. I parametri k e a sono delle costanti con $k > 0$. Determinare:

- 1) gli autovalori dell'Hamiltoniana H delle due particelle nel sistema del centro di massa;
- 2) le relative degenerazioni;
- 3) gli autovalori di H nel caso in cui le particelle siano identiche.

[punteggio 7]

6 Si consideri un sistema di N particelle identiche distribuite tra due livelli energetici: n_1 particelle occupano lo stato di singola particella a energia ε_1 e $n_2 = N - n_1$ quello a energia ε_2 . Il sistema è in equilibrio termico con un reservoir a temperatura T . Supponendo di poter applicare la statistica classica, determinare per le occupazioni n_1 e n_2 sopra indicate

- 1) l'energia media E del sistema;
- 2) l'entropia S del sistema;
- 3) la variazione di entropia del sistema ΔS ottenuta in seguito al cambiamento delle occupazioni $n_1 \rightarrow n_1 + 1, n_2 \rightarrow n_2 - 1$;
- 4) la corrispondente variazione di entropia $\Delta S'$ del reservoir.
- 5) Osservando che l'entropia di un sistema isolato è costante, ricavare l'espressione di n_2/n_1 in funzione di temperatura del reservoir e energie dei livelli del sistema (legge di Boltzmann). Si assuma $n_1, n_2 \gg 1$.

[punteggio 7]

Dalla definizione di L abbiamo

$$L_i = \varepsilon_{ikn} x_k P_n$$

dove ε_{ikn} è il simbolo di Levi-Civita

$$\varepsilon_{ikn} = \begin{cases} 1 & i, k, n = 1, 2, 3 \text{ e permutazioni} \\ -1 & i, k, n = 1, 3, 2 \text{ e permutazioni} \\ 0 & \text{due o più indici uguali} \end{cases}$$

$$\begin{aligned} [L_i, x_j] &= [\varepsilon_{ikn} x_k P_n, x_j] \\ &= \varepsilon_{ikn} x_k [P_n, x_j] \\ &= \varepsilon_{ikn} x_k (-i\hbar \delta_{nj}) \\ &= -i\hbar \varepsilon_{ikj} x_k \\ &= i\hbar \varepsilon_{ijk} x_k \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} [L_i, P_j] &= [\varepsilon_{ikn} x_k P_n, P_j] \\ &= \varepsilon_{ikn} [x_k, P_j] P_n \\ &= \varepsilon_{ikn} (i\hbar \delta_{kj}) P_n \\ &= i\hbar \varepsilon_{ijn} P_n \end{aligned}$$

In generale $[L_i, v_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} v_k$ se $\underline{v} = (v_1, v_2, v_3)$ è un operatore vettoriale.

Esercizio 2

La particella si trova nell'autostato $|p\rangle$ della quantità di moto corrispondente alla funzione d'onda

$$\psi_{\underline{p}}(\underline{r}) = \langle \underline{r} | \underline{p} \rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{\frac{i}{\hbar} \underline{p} \cdot \underline{r}}$$

Scegliendo il sistema di riferimento con asse z lungo \underline{p} abbiamo $\underline{p} = p \hat{z}$

$$\psi_{\underline{p}}(\underline{r}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{\frac{i}{\hbar} p z} = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{\frac{i}{\hbar} p r \cos\theta}$$

$$\text{e } L_{\underline{p}} = L_z \rightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}$$

dove (r, θ, φ) sono le coordinate polari di \underline{r}

Risulta

$$L_{\underline{p}} \psi_{\underline{p}}(\underline{r}) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} \left(\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{\frac{i}{\hbar} p r \cos\theta} \right) = 0$$

cioè $\psi_{\underline{p}}(\underline{r})$ è autofunzione di $L_{\underline{p}}$ con autovalore 0

Misurando $L_{\underline{p}}$ si ottiene quindi il risultato 0 con certezza.

Nel caso di un sistema di particelle composto dai sottosistemi 1 e 2 lo spazio di Hilbert totale si fattorizza come $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$

Se sono $\{|n\rangle_1\}_n$ e $\{|m\rangle_2\}_m$ delle BDN in \mathcal{H}_1 e \mathcal{H}_2 allora $\{|n\rangle_1 |m\rangle_2\}_{n,m}$ è una BDN in $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$

Definiamo operatore matrice densità ridotta del sottosistema 1

$$\rho_1 = \sum_m \langle m | \rho | m \rangle_2 = \text{tr}_2 \rho$$

È facile vedere che se \mathcal{F}_1 è un operatore che agisce solo su \mathcal{H}_1 , allora posto $\mathcal{F} = \mathcal{F}_1 \otimes \mathcal{I}_2$ si ha

$$\text{tr}(\mathcal{F} \rho) = \text{tr}_1(\mathcal{F}_1 \rho_1)$$

Se ρ rappresenta uno stato puro o miscelato, ρ_1 rappresenta sempre uno stato miscelato.

Esercizio 4

Lo stato fondamentale del problema è rappresentato da una funzione d'onda pari che si annulla in $x = \pm a$, proprietà possedute da $\psi(x; \gamma)$ se $\gamma > 0$. Se $\gamma = 0$ $\psi = 0$. Se $\gamma < 0$ ψ diverge in $x = 0$.

L'energia media della particella nello stato $\psi(x; \gamma)$ è

$$E(\gamma) = \frac{\langle \psi(\gamma) | H | \psi(\gamma) \rangle}{\langle \psi(\gamma) | \psi(\gamma) \rangle}$$

Osservando che $\psi(x; \gamma)$ e $\psi''(x; \gamma)$ sono funzioni pari

$$\psi(x; \gamma) = \begin{cases} x^\gamma - a^\gamma & x > 0 \\ (-x)^\gamma - a^\gamma & x < 0 \end{cases} = |x|^\gamma - a^\gamma$$

$$\psi'(x; \gamma) = \begin{cases} \gamma x^{\gamma-1} & x > 0 \\ -\gamma (-x)^{\gamma-1} & x < 0 \end{cases} = \text{sign}(x) \gamma |x|^{\gamma-1}$$

$$\psi''(x; \gamma) = \begin{cases} \gamma(\gamma-1) x^{\gamma-2} & x > 0 \\ \gamma(\gamma-1) (-x)^{\gamma-2} & x < 0 \end{cases} = \gamma(\gamma-1) |x|^{\gamma-2}$$

abbiamo

$$\begin{aligned} \langle \psi(\gamma) | H | \psi(\gamma) \rangle &= \int_{-a}^a \overline{\psi(x; \gamma)} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \right) \psi(x; \gamma) dx \\ &= 2 \int_0^a \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \right) (x^\gamma - a^\gamma) \gamma(\gamma-1) x^{\gamma-2} dx \\ &= -\frac{\hbar^2}{m} \gamma(\gamma-1) \int_0^a (x^{2\gamma-2} - a^\gamma x^{\gamma-2}) dx \\ &= -\frac{\hbar^2}{m} \gamma(\gamma-1) \left(\frac{a^{2\gamma-1}}{2\gamma-1} - a^\gamma \frac{a^{\gamma-1}}{\gamma-1} \right) \\ &= -\frac{\hbar^2}{m} \gamma(\gamma-1) \frac{(\gamma-1) - (2\gamma-1)a^{\gamma-1}}{(2\gamma-1)(\gamma-1)} a^{2\gamma-1} \end{aligned}$$

$$= \frac{\hbar^2}{m} \frac{\gamma^2}{2\gamma-1} a^{2\gamma-1}$$

$$\langle \psi(\gamma) | \psi(\gamma) \rangle = \int_{-a}^a \overline{\psi(x, \gamma)} \psi(x, \gamma) dx$$

$$= 2 \int_0^a (x^\gamma - a^\gamma) (x^\gamma - a^\gamma) dx$$

$$= 2 \int_0^a (x^{2\gamma} + a^{2\gamma} - 2a^\gamma x^\gamma) dx$$

$$= 2 \left(\frac{a^{2\gamma+1}}{2\gamma+1} + a^{2\gamma} a - 2a^\gamma \frac{a^{\gamma+1}}{\gamma+1} \right)$$

$$= 2 a^{2\gamma+1} \frac{(\gamma+1) + (2\gamma+1)(\gamma+1) - 2(2\gamma+1)}{(2\gamma+1)(\gamma+1)}$$

$$= 2 a^{2\gamma+1} \frac{\cancel{\gamma+1} + 2\gamma^2 + 2\gamma + \cancel{\gamma+1} - 4\gamma - 2}{2\gamma^2 + 2\gamma + \gamma + 1}$$

$$= 2 a^{2\gamma+1} \frac{2\gamma^2}{2\gamma^2 + 3\gamma + 1}$$

Partanto

$$E(\gamma) = \frac{\hbar^2}{m} \frac{\gamma^2}{2\gamma-1} a^{2\gamma-1} \frac{2\gamma^2 + 3\gamma + 1}{2\gamma^2} \frac{1}{2a^{2\gamma+1}}$$

$$= \frac{\hbar^2}{4ma^2} \frac{2\gamma^2 + 3\gamma + 1}{2\gamma-1}$$

Concludiamo il minimo valore di $E(\gamma)$ al valore di γ

$$\frac{d}{d\gamma} E(\gamma) = \frac{\hbar^2}{4ma^2} \frac{(4\gamma+3)(2\gamma-1) - (2\gamma^2 + 3\gamma + 1)2}{(2\gamma-1)^2} = 0$$

$$E'(y) \text{ si annulla per } (4y+3)(2y-1) - (2y^2+3y+1)^2 = 0$$

$$8y^2 - 4y + 6y - 3 - 4y^2 - 6y - 2 = 0$$

$$4y^2 - 4y - 5 = 0$$

$$\text{cioè } y = \frac{3 \pm \sqrt{4+20}}{4} = \frac{1 \pm \sqrt{6}}{2}$$

$$E\left(\frac{1 \pm \sqrt{6}}{2}\right) = \frac{\hbar^2}{4ma^2} \frac{2 \frac{1+6 \pm 2\sqrt{6}}{4} + 3 \frac{1 \pm \sqrt{6}}{2} + 1}{2 \frac{1 \pm \sqrt{6}}{2} - 1}$$

$$= \frac{\hbar^2}{4ma^2} \frac{\frac{7}{2} \pm \sqrt{6} + \frac{3}{2} \pm \frac{3}{2}\sqrt{6} + 1}{\pm \sqrt{6}}$$

$$= \frac{\hbar^2}{4ma^2} \frac{6 \pm \frac{5}{2}\sqrt{6}}{\pm \sqrt{6}}$$

$$= \frac{\hbar^2}{4ma^2} \frac{\frac{5}{2} \pm \sqrt{6}}{6} = \frac{\hbar^2}{4ma^2} \left(\frac{5}{2} \pm \sqrt{6} \right)$$

Si osserva che $E(y)$ per $y = \frac{1}{2}(1 - \sqrt{6}) < 0$ è negativa, risultato non accettabile. Invece per $y = \frac{1}{2}(1 + \sqrt{6}) > 0$ $E(y)$ presenta un minimo che può essere considerato lo stimo variazionale all'energia dello stato fondamentale.

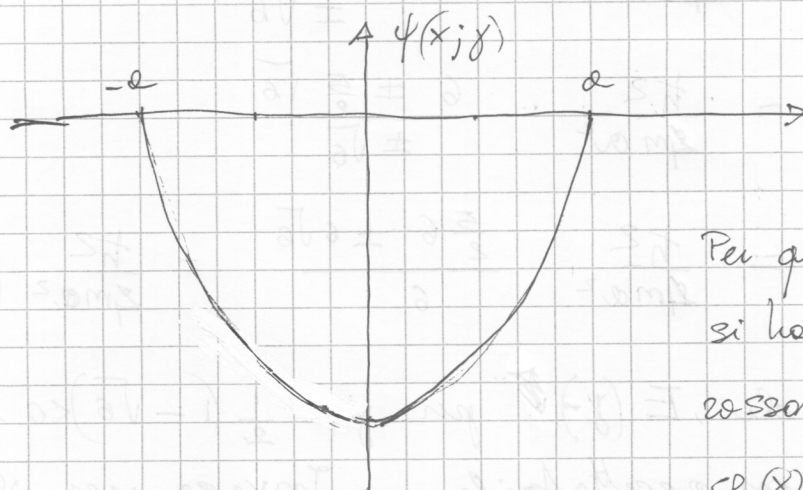
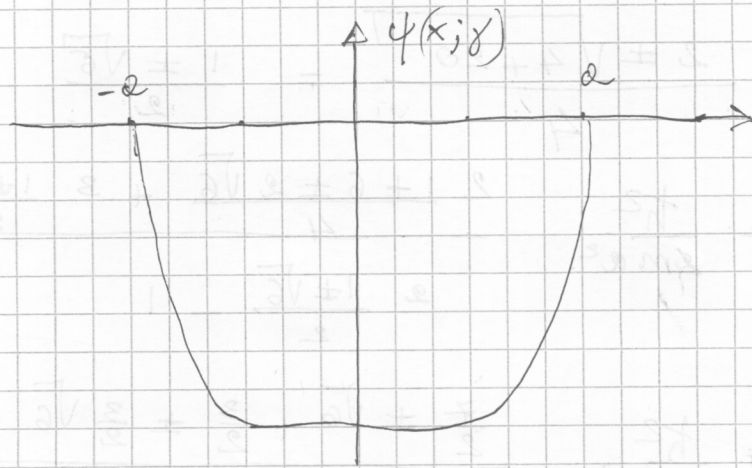
$$E_0^{\text{var}} = E\left(y = \frac{1}{2}(1 + \sqrt{6})\right) = \frac{\hbar^2}{4ma^2} \left(\frac{5}{2} + \sqrt{6} \right)$$

È noto che il valore esatto di E_0 è

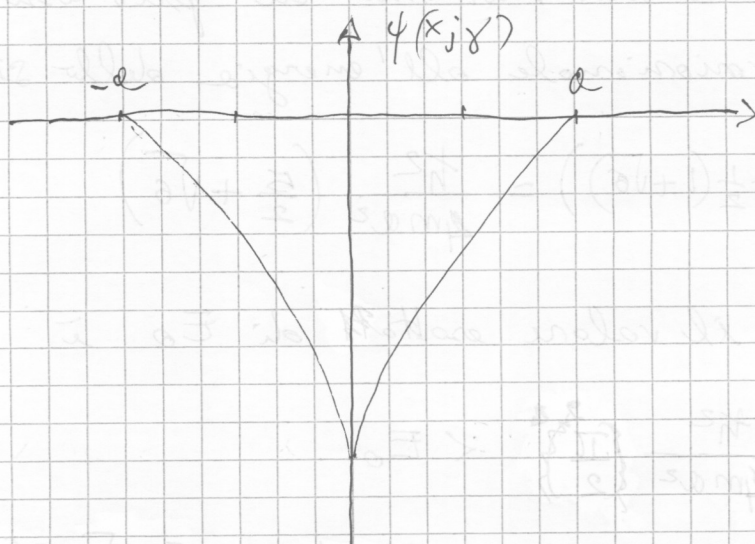
$$E_0 = \frac{\hbar^2}{8ma^2} \pi^2 < E_0^{\text{var}}$$

$$\text{Errore relativo} = \frac{E_0^{\text{var}} - E_0}{E_0} =$$

$$= \frac{\frac{5}{2} + \sqrt{6} - \frac{\pi^2}{2}}{\frac{\pi^2}{2}} = \frac{2}{\pi^2} \left(\frac{5}{2} + \sqrt{6} \right) - 1 \approx 0,003$$



Per questo valore di γ
 si ha la massima
 rassomiglianza a
 $\varphi_0(x) = -\cos\left(\frac{\pi x}{a}\right)$



Esercizio (5)

Posto $X \equiv x_1 - x_2$ e $S = S_1 + S_2$

e detta μ la massa relativa $\frac{1}{\mu} = \frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2}$ abbiamo

$$H = \frac{P_x^2}{2\mu} + \frac{1}{2} K X^2 + \frac{a}{2} (S^2 - S_1^2 - S_2^2)$$

$$= \frac{P_x^2}{2\mu} + \frac{1}{2} \mu \omega^2 X^2 + \frac{a}{2} \left(S^2 - \frac{3}{4} \hbar^2 - \frac{3}{4} \hbar^2 \right)$$

$$= \frac{P_x^2}{2\mu} + \frac{1}{2} \mu \omega^2 X^2 + \frac{a}{2} S^2 - \frac{3}{4} a \hbar^2$$

dove $\omega = \sqrt{\frac{K}{\mu}} = \sqrt{K \left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} \right)}$ e $P_x = -i\hbar \frac{d}{dx}$

Nel sistema del centro di massa l'Hamiltoniana è la somma di una Hamiltoniana di oscillatore armonico unidimensionale e del termine di spin $\frac{a}{2} (S^2 - \frac{3}{2} \hbar^2)$.

S^2 ha autovalori $\hbar^2 s(s+1)$ con $s_1 - s_2 \leq s \leq s_1 + s_2$ e salti di 1 cioè $s = 0, 1$

Gli autovalori di H sono pertanto

$$E_{n,s} = \hbar \omega \left(n + \frac{1}{2} \right) + \frac{a \hbar^2}{2} \left(s(s+1) - \frac{3}{2} \right)$$

$n = 0, 1, 2, \dots$ $s = 0, 1$

cioè

$$\begin{cases} E_{n,0} = \hbar \omega \left(n + \frac{1}{2} \right) - \frac{3}{4} a \hbar^2 & \text{degenerazione 1} \\ E_{n,1} = \hbar \omega \left(n + \frac{1}{2} \right) + \frac{1}{4} a \hbar^2 & \text{degenerazione 3} \end{cases}$$

$n = 0, 1, 2, \dots$

Se le particelle fossero identiche, poiché sono fermioni, lo stato totale, prodotto di quello di oscillatore armonico e di quello di spin, dovrebbe essere antisimmetrico per scambio delle particelle stesse.

Lo stato di singoletto $S=0$ è antisimmetrico e quindi può essere associato solo a stati simmetrici spaziali ottenuti per n pari. Viceversa gli stati di tripletto $S=1$ sono simmetrici e possono essere associati solo a stati spaziali con n dispari.

$$E_{n,0} = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega - \frac{3}{4} \alpha \hbar^2 \quad n = 0, 2, 4, \dots$$

$$E_{n,1} = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega + \frac{1}{4} \alpha \hbar^2 \quad n = 1, 3, 5, \dots$$

Ora naturalmente $\omega = \sqrt{\frac{2K}{m}}$ dove $m = m_1 = m_2$

Il sistema di N particelle in cui n_1 particelle occupano lo stato a energia ε_1 e n_2 quello a energia ε_2 è definito da

$$\frac{N!}{n_1! n_2!} \quad \text{microstati ciascuno a energia } \varepsilon_1 n_1 + \varepsilon_2 n_2$$

l'energia media sarà quindi (stesso valore per ogni microstato)

$$E = \varepsilon_1 n_1 + \varepsilon_2 n_2$$

mentre l'entropia vale

$$S = k_B \log \frac{N!}{n_1! n_2!} \quad (n_2 = N - n_1)$$

Nell'evento $n_1 \rightarrow n_1 + 1$ $n_2 \rightarrow n_2 - 1$

la variazione di entropia del sistema è dunque

$$\Delta S = k_B \log \frac{N!}{(n_1+1)! (n_2-1)!} - k_B \log \frac{N!}{n_1! n_2!}$$

$$= k_B \log \left(\frac{N!}{(n_1+1)! (n_2-1)!} \cdot \frac{n_1! n_2!}{N!} \right)$$

$$= k_B \log \frac{n_2}{n_1+1}$$

Il cambiamento di entropia del reservoir a temperatura T sarà invece

$$\Delta S' = \frac{1}{T} \left(-E(n_1+1, n_2-1) + E(n_1, n_2) \right) =$$

$$= \frac{1}{T} \left(-(n_1 + 1) \varepsilon_1 - (n_2 - 1) \varepsilon_2 + n_1 \varepsilon_1 + n_2 \varepsilon_2 \right)$$

$$= \frac{1}{T} (\varepsilon_2 - \varepsilon_1)$$

Imponendo $\Delta S + \Delta S' = 0$ e usando $n_1 + 1 \approx n_1$ otteniamo

$$k_B \log \frac{n_2}{n_1} = -\frac{1}{T} (\varepsilon_2 - \varepsilon_1)$$

cioè

$$\frac{n_2}{n_1} = \exp\left(-\frac{\varepsilon_2 - \varepsilon_1}{k_B T}\right)$$

che è la legge di Boltzmann