MECCANICA QUANTISTICA E MECCANICA STATISTICA
A.A. 2017/2018 – Prof. C. Presilla

Prova A5 – 11 settembre 2018

Cognome	
Nome	
Matricola	

penalità										

esercizio	voto
1	
2	
3	
4	
5	
6	

1 Siano $|A\rangle$ e $|B\rangle$ i vettori, non normalizzati, che rappresentano due stati di un sistema fisico. Quanto vale la probabilità di transizione $P(|A\rangle \to |B\rangle)$? Giustificare perché questo postulato rappresenta una buona definizione di probabilità di transizione.

[punteggio 4]

2 Sia $H = p^2/2m + V(q)$ la Hamiltoniana di un sistema fisico e $|E_k\rangle$, $k = 1, 2, 3, \dots$, gli autovettori di H relativi agli autovalori E_k (degeneri o non). Dimostrare che $\langle E_k|p|E_k\rangle = 0$.

[punteggio 4]

3 Determinare la funzione di gran partizione Z_G di un gas ideale classico composto da particelle di massa m, all'equilibrio a temperatura T e potenziale chimico μ.

[punteggio 4]

4 Una particella di massa m e spin 1/2, vincolata in una dimensione, è descritta dalla Hamiltoniana

$$H = H_0 + 2\omega S_z, \qquad H_0 = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 q^2.$$

Posto $H_0|n\rangle = (n+1/2)\hbar\omega|n\rangle$ e $S_z|\pm\rangle = \pm(\hbar/2)|\pm\rangle$, con $|n\rangle$ e $|\pm\rangle$ stati normalizzati,
1) determinare lo spettro di H inclusa la degenerazione.
2) Sia $|\psi(0)\rangle = C(|1\rangle|-\rangle + \sqrt{3}|1\rangle|+\rangle)$ lo stato del sistema al tempo $t = 0$, determinare la costante di normalizzazione C e lo stato $|\psi(t)\rangle$ al tempo $t > 0$.
Sia A un'osservabile corrispondente a un operatore che agisce solo sulla parte spaziale nel seguente modo:

$$A|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n+1}}|n\rangle, \qquad n = 0, 1, 2, \ldots.$$

3) Determinare i possibili risultati di una misura di AS_x al tempo t e le relative probabilità.

[punteggio 7]

---

5 Una particelle di massa μ, carica q e spin 1/2 è descritta dalla Hamiltoniana

$$H = \frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2\mu} - \frac{e^2}{\sqrt{x^2+y^2+z^2}} + \frac{E_I}{3}\left(1 + \frac{S_x}{\hbar}\right), \qquad e^2 = \frac{q^2}{4\pi\varepsilon_0}, \qquad E_I = \frac{\mu e^4}{2\hbar^2}.$$

Si osservi che E_I è l'energia di ionizzazazione dell'atomo di idrogeno. Determinare:
1) i livelli energetici del sistema con $E \leq E_I/18$, indicandone la degenerazione e i corrispondenti vettori di stato;
2) l'evoluzione temporale al tempo t dello stato che a $t = 0$ è dato da $|\psi(0)\rangle = |n = 2, l = 1, m = 1\rangle|s = 1/2, s_z = -1/2\rangle$ (i numeri quantici n, l, m e s, s_z sono quelli soliti dell'atomo di idrogeno e dello spin elettronico).
3) la correzione, al primo ordine perturbativo, dell'energia dello stato fondamentale indotta dalla perturbazione $H_P = \lambda(xS_x)^2/(x^2+y^2+z^2)^{3/2}$.

[punteggio 7]

---

6 Un sistema in equilibrio termico alla temperatura T è composto da N microsistemi distiguibili non interagenti tra di loro. Ogni microsistema ha livelli energetici $\epsilon_k = \alpha k$, $k = 0, 1, 2, \ldots$. Calcolare:
1) la somma di partizione canonica del sistema;
2) l'energia media E del sistema;
3) il valore limite di E per bassa temperatura ($k_B T \ll \alpha$);
4) l'entropia S del sistema.

[punteggio 7]

Esercizio 1

$$P\big(|A\rangle \to |B\rangle\big) = \frac{|\langle B|A\rangle|^2}{\langle A|A\rangle\ \langle B|B\rangle}$$

- P non dipende dalla normalizzazione dei vettori $|A\rangle$ e $|B\rangle$ (dipende dagli stati)

$$P\big(\alpha|A\rangle \to \beta|B\rangle\big) = P\big(|A\rangle \to |B\rangle\big)$$

- $0 \leq P \leq 1$

$P \geq 0$ poichè $\langle A|A\rangle = \|A\|^2 > 0 \quad |A\rangle \neq 0$

$P \leq 1$ per la disuguaglianza di Schwarz

$$|\langle A|B\rangle|^2 \leq \langle A|A\rangle\ \langle B|B\rangle$$

Esercizio 2

$$[H, q] = \frac{1}{2m}[p^2, q] = \frac{1}{2m}\left(p[p,q] + [p,q]p\right)$$

$$= -i\frac{\hbar}{m}p$$

Poiché $H = H^+$, da $H|E_n\rangle = E_n|E_n\rangle$

segue $\langle E_n|H^+ = \langle E_n|H = \langle E_n|E_n$

quindi

$$\langle E_n|p|E_n\rangle = i\frac{m}{\hbar}\langle E_n|[H,q]|E_n\rangle$$

$$= i\frac{m}{\hbar}\left(E_n\langle E_n|q|E_n\rangle - \langle E_n|q|E_n\rangle E_n\right)$$

$$= 0$$

La proprietà vale anche per q, $\langle E_n|q|E_n\rangle = 0$, e in ogni dimensione.

Esercizio 3

Per un gas ideale classico di N particelle di massa m la funzione di partizione è

$$Z_N = \frac{1}{N!\, h^{3N}} \int_V dq_1 \cdots dq_{3N} \int_I dp_1 \dots dp_{3N}\, e^{-\beta \sum_{i=1}^{3N} \frac{p_i^2}{2m}}$$

$$= \frac{V^N}{N!} \left(\frac{2m\pi}{\beta h^2} \right)^{\frac{3N}{2}}$$

$$= \frac{1}{N!} \left(\frac{V}{\lambda^3} \right)^N$$

avendo definito la lunghezza d'onda termica $\lambda = \frac{h}{\sqrt{2\pi m k_B T}}$ ed essendo $\beta = 1/(k_B T)$ con T temperatura del gas.

La funzione di gran partizione, a potenziale chimico μ, è

$$Z_G = \sum_{N=0}^{\infty} e^{\beta\mu N} Z_N$$

$$= \sum_{N=0}^{\infty} \frac{1}{N!} \left(\frac{e^{\beta\mu} V}{\lambda^3} \right)^N$$

$$= \exp\left(\frac{e^{\beta\mu} V}{\lambda^3} \right) = e^{\frac{zV}{\lambda^3}}$$

avendo definito la fugacità $z = e^{\beta\mu}$

Esercizio 4

1) Gli autovalori sono i numeri $\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega \pm \hbar\omega$ che ordinati danno $\left(n \pm 1 + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega$

$E_0 = -\frac{\hbar\omega}{2}$ non degenere $|0\rangle|-\rangle$

$E_1 = +\frac{\hbar\omega}{2}$ non degenere $|1\rangle|-\rangle$

$E_2 = \frac{3}{2}\hbar\omega$ 2 volte degenere $|0\rangle|+\rangle$ $|2\rangle|-\rangle$

$E_3 = \frac{5}{2}\hbar\omega$ 2 volte degenere $|1\rangle|+\rangle$ $|3\rangle|-\rangle$

$E_4 = \frac{7}{2}\hbar\omega$ 2 volte degenere $|2\rangle|+\rangle$ $|4\rangle|-\rangle$

$\vdots$

2) $1 = \langle\psi(0)|\psi(0)\rangle = |C|^2 (1+3)$

scegliamo $C = \frac{1}{2}$

$$|\psi(0)\rangle = \frac{1}{2}\left(|1\rangle|-\rangle + \sqrt{3}\,|1\rangle|+\rangle\right)$$

$$|\psi(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}|\psi(0)\rangle$$

$$= \frac{1}{2}e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{\hbar\omega}{2}t}|1\rangle|-\rangle + \frac{\sqrt{3}}{2}e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{5}{2}\hbar\omega t}|1\rangle|+\rangle$$

$$= e^{-\frac{\omega}{2}t}\,\frac{1}{2}\left(|1\rangle|-\rangle + \sqrt{3}\,e^{-i2\omega t}|1\rangle|+\rangle\right)$$

3) Gli autovettori e autovalori di AS_x sono

$$A S_x |n\rangle |\pm\rangle_x = \frac{1}{\sqrt{n+1}} \frac{\hbar}{2} |n\rangle |\pm\rangle_x \qquad n = 0, 1, 2, \dots$$

$$|\pm\rangle_x = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \pm 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|+\rangle_z \pm |-\rangle_z \right) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|+\rangle \pm |-\rangle \right)$$

Misurando AS_x quando il sistema si trova nello stato corrispondente al vettore $|\psi(t)\rangle$ i valori ottenibili e le corrispondenti probabilità sono

$+\frac{1}{\sqrt{2}} \frac{\hbar}{2}$

$$P_+ = \left| \langle 1 | {}_x\langle + | \psi(t) \rangle \right|^2 =$$

$$= \left| \frac{1}{\sqrt{2}} \langle 1 | \left(\langle + | + \langle - | \right) |\psi(t)\rangle \right|^2$$

$$= \left| \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{\sqrt{3}}{2} e^{-i2\omega t} + \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{1}{2} \right|^2$$

$$= \frac{1}{8} \left(\sqrt{3} e^{-i2\omega t} + 1 \right) \left(\sqrt{3} e^{i2\omega t} + 1 \right)$$

$$= \frac{1}{8} \left(3 + 1 + \sqrt{3} e^{-i2\omega t} + \sqrt{3} e^{i2\omega t} \right)$$

$$= \frac{1}{2} + \frac{\sqrt{3}}{4} \cos(2\omega t)$$

$-\frac{1}{\sqrt{2}} \frac{\hbar}{2}$

$$P_- = \left| \langle 1 | {}_x\langle - | \psi(t) \rangle \right|^2$$

$$= \left| \frac{1}{\sqrt{2}} \langle 1 | \left(\langle + | - \langle - | \right) |\psi(t)\rangle \right|^2$$

$$= \left| \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{\sqrt{3}}{2} e^{-i2\omega t} - \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{1}{2} \right|^2$$

$$= \frac{1}{2} - \frac{\sqrt{3}}{4} \cos(2\omega t)$$

noto che

$0 \le P_\pm \le 1$

$P_+ + P_- = 1$

Esercizio 5

1) Si osservi che $H = H_0 + \frac{E_I}{3}\left(1 + \frac{S_x}{\hbar}\right)$

dove H_0 è la Hamiltoniana dell'atomo di idrogeno

$$H_0 |n\, l\, m\rangle = E_n\, |n\, l\, m\rangle$$

$$E_n = -\frac{m e^4}{2\hbar^2}\frac{1}{n^2} = -E_I \frac{1}{n^2} \qquad n = 1, 2, 3, \dots$$

$$l = 0, 1, 2, \dots, n-1 \qquad m = -l, \dots, l$$

$$g_n = n^2$$

Gli autovettori e autovalori di S_x sono

$$S_x\, |\tfrac{1}{2}, \pm\rangle_x = \pm \frac{\hbar}{2} |\tfrac{1}{2}, \pm\rangle_x$$

Gli autovettori e autovalori di H sono pertanto

$$H\, |n, l, m\rangle\, |\tfrac{1}{2}, \pm\rangle_x = \left(-\frac{E_I}{n^2} + \frac{E_I}{3}\left(1 \pm \frac{1}{2}\right)\right) |n\, l\, m\rangle |\tfrac{1}{2} \pm\rangle_x$$

ordinando lo spettro si ha

$E = -E_I + \frac{E_I}{6} = -\frac{5}{6}E_I \qquad n=1 \quad s_x = -\frac{1}{2} \quad deg = 1$

$E = -E_I + \frac{3}{6}E_I = -\frac{1}{2}E_I \qquad n=1 \quad S_x = \frac{1}{2} \quad deg = 1$

$E = -\frac{E_I}{4} + \frac{E_I}{6} = -\frac{1}{12}E_I \qquad n=2 \quad S_x = -\frac{1}{2} \quad deg = 4$

$E = -\frac{E_I}{9} + \frac{E_I}{6} = \frac{1}{18}E_I \qquad n=3 \quad S_x = -\frac{1}{2} \quad deg = 9$

2) lo stato al tempo $t=0$ è

$$|\psi(0)\rangle = |2,1,1\rangle \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}\rangle_x - |\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}\rangle_x\right)$$

$$|\psi(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}|\psi(0)\rangle$$

$$= e^{-\frac{i}{\hbar}\left(-\frac{E_I}{4}+\frac{E_I}{3}\frac{3}{2}\right)t}\frac{1}{\sqrt{2}}|2,1,1\rangle|\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}\rangle_x$$

$$- e^{-\frac{i}{\hbar}\left(-\frac{E_I}{4}+\frac{E_I}{3}\frac{1}{2}\right)t}\frac{1}{\sqrt{2}}|2,1,1\rangle|\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}\rangle_x$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}}|2,1,1\rangle\left(e^{-i\frac{E_I}{4\hbar}t}|\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}\rangle_x - e^{i\frac{E_I}{12\hbar}t}|\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}\rangle_x\right)$$

$$= e^{-\frac{iE_I}{12\hbar}t}\frac{1}{\sqrt{2}}|2,1,1\rangle\left(e^{-i\alpha t}|\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}\rangle_x - e^{i\alpha t}|\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}\rangle_x\right)$$

dove $\alpha = \frac{E_I}{6\hbar}$

3) lo stato fondamentale è $|E_0\rangle = |1,0,0\rangle\,|\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}\rangle_x$

non degenere a energia $E_0 = -\frac{5}{6}E_I$

La correzione a E_0 indotta dalla perturbazione è

$$\Delta E = \langle E_0 | H_p | E_0 \rangle$$

$$= \lambda \langle 1,0,0| \frac{x^2}{\sqrt{(x^2+y^2+z^2)^{3/2}}} |1,0,0\rangle \; {}_x\langle \tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}| S_x^2 |\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}\rangle_x$$

$$= \lambda \frac{1}{3} \langle 1,0,0| \frac{r^2}{r^3} |1,0,0\rangle \; \frac{\hbar^2}{4}$$

$$= \frac{\lambda\hbar^2}{12} \langle 1,0,0| \frac{1}{r} |1,0,0\rangle$$

avendo sfruttato le proprietà di simmetria dello stato fondamentale

$$\psi_0(r,\theta,\varphi) = \langle \mathbf{r} | E_0\rangle = \frac{2}{a_B^{3/2}} e^{-\frac{r}{a_B}} \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$

$$\langle 1,0,0| \frac{1}{r} |1,0,0\rangle = 4\pi \int_0^\infty r^2 dr \, \frac{1}{r} \frac{1}{\pi a_B^3} e^{-\frac{2r}{a_B}}$$

$$= \frac{4}{a_B^3} \int_0^\infty u e^{-u} du \left(\frac{a_B}{2}\right)^2$$

$$= \frac{1}{a_B}$$

$$\Delta E = \frac{\lambda\hbar^2}{12 a_B}$$

Esercizio 6

1) $Z = Z_1^N$

$$Z_1 = \sum_{k=0}^{\infty} e^{-\beta E_k} = \sum_{k=0}^{\infty} \left(e^{-\beta\alpha}\right)^k$$

$$= \left(1 - e^{-\beta\alpha}\right)^{-1}$$

2) $$E = -\frac{\partial}{\partial\beta} \ln Z$$

$$= -N \frac{\partial}{\partial\beta} \ln Z_1$$

$$= -N (-1) \left(1 - e^{-\beta\alpha}\right)^{-1} \alpha e^{-\beta\alpha}$$

$$= N \frac{\alpha e^{-\beta\alpha}}{1 - e^{-\beta\alpha}}$$

$$= N\alpha \frac{1}{e^{\beta\alpha} - 1}$$

3) $$\lim_{\beta\to\infty} E(\beta) = 0$$

infatti a bassa temperatura $k_B T \ll \alpha$ $(\alpha\beta \gg 1)$ ogni microsistema si trova nel livello

$E_0 = 0$

4) $S = -\frac{\partial F}{\partial T} = -\frac{\partial}{\partial T}\left(-k_B T \ln Z\right)$

$= k_B \ln Z + k_B T \frac{\partial}{\partial T} \ln Z$

$= \frac{k_B T}{T} \ln Z + k_B T \left(\frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z\right) \frac{\partial \beta}{\partial T}$

$= -\frac{F}{T} + \frac{E}{T}$

$= \frac{E - F}{T}$

$\frac{F}{T} = -k_B \ln Z$

$= -N k_B \ln Z_1 = +N k_B \ln\left(1 - e^{-\beta\alpha}\right)$

$\frac{E}{T} = N k_B \, \frac{\alpha}{k_B T} \, \frac{1}{e^{\beta\alpha} - 1}$

$S = N k_B \left(\frac{\beta\alpha}{e^{\beta\alpha} - 1} - \ln\left(1 - e^{-\beta\alpha}\right)\right)$

$S \xrightarrow[\beta \to \infty]{} 0$

$S \xrightarrow[\beta \to 0]{} N k_B \left(1 - \ln(\beta\alpha)\right) \simeq N k_B \ln\left(\frac{k_B T}{\alpha}\right) = k_B \ln\left(\frac{k_B T}{\alpha}\right)^N$

$= k_B \ln\left(\text{\# microstati accessibili}\right)$