

MECCANICA QUANTISTICA E MECCANICA STATISTICA

A.A. 2020/2021 – Prof. C. Presilla

Prova A3 – 25 giugno 2021

Cognome									
Nome									
Matricola									

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

esercizio	1	2	3	4	5	6
voto						

- 1** Siano ξ ed η due generici operatori, non necessariamente autoaggiunti, che commutano con $[\xi, \eta]$. Dimostrare che

$$\xi^2\eta + \eta\xi^2 = 2\xi\eta\xi, \quad \eta^2\xi + \xi\eta^2 = 2\eta\xi\eta.$$

[punteggio 3]

- 2** Una particella si trova nello stato descritto dalla funzione d'onda

$$\psi(\mathbf{r}) = (x^2 - y^2)f(r), \quad \mathbf{r} = (x, y, z), \quad r = |\mathbf{r}|.$$

Quali sono i possibili risultati di una misura di L_z , terza componente del momento angolare orbitale \mathbf{L} della particella, e le rispettive probabilità? Quali i possibili risultati di una misura di L^2 ?

[punteggio 5]

- 3** Un sistema di N particelle aventi spin $\hbar/2$ è sottoposto a un campo magnetico esterno. Determinare il numero di microstati \mathcal{N} del sistema in corrispondenza al macrostato caratterizzato dall'autovalore $\hbar M_z$ della terza componente dello spin totale (si osservi che $M_z = -N/2, -N/2 + 1, \dots, N/2 - 1, N/2$). Calcolare, nel limite di N molto grande, il valore di M_z per cui $\mathcal{N}(M_z)$ risulta massimo.

[punteggio 5]

4 Una particella di massa m si muove lungo l'asse x sotto l'influenza del potenziale $V(x)$. La particella si trova in un autostato dell'energia con autofunzione

$$\psi(x) = (\gamma^2/\pi)^{1/4} e^{-\gamma^2 x^2/2}$$

ed energia $E = \hbar^2 \gamma^2 / (2m)$. Determinare:

- 1) la posizione media della particella;
- 2) la quantità di moto media della particella;
- 3) il valore del potenziale $V(x)$.

[punteggio 6]

5 L'Hamiltoniana che descrive l'interazione tra due particelle di spin 1/2 è

$$H = a + \frac{4b}{\hbar^2} \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2,$$

dove a e b sono costanti reali e $\mathbf{S}_1, \mathbf{S}_2$ gli operatori di spin delle due particelle. Sia $\mathbf{S} = \mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2$ lo spin totale del sistema.

- 1) Dimostrare che H , S^2 e S_z possono essere misurati contemporaneamente.
- 2) Scrivere la matrice che rappresenta H e calcolarne i corrispondenti autovalori nella base dei vettori $|s, m, s_1, s_2\rangle$,
- 3) Scrivere la matrice che rappresenta H e calcolarne i corrispondenti autovalori nella base dei vettori $|s_1, m_1, s_2, m_2\rangle$.

Si osservi che, in accordo con la solita convenzione, s, m, s_1, m_1, s_2, m_2 indicano gli autovalori $\hbar^2 s(s+1), \hbar m, \hbar^2 s_1(s_1+1), \hbar m_1, \hbar^2 s_2(s_2+1), \hbar m_2$ di $S^2, S_z, S_1^2, S_{1z}, S_2^2, S_{2z}$.

All'Hamiltoniana viene aggiunta la perturbazione $H' = \epsilon \mathbf{B} \cdot (\mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2)$ con \mathbf{B} diretto lungo l'asse z .

- 4) Determinare, al primo ordine in ϵ , la variazione dell'energia dello stato fondamentale indotta da H' nell'ipotesi che la costante b sia negativa.

[punteggio 8]

6 Un oscillatore armonico unidimensionale di pulsazione ω è in contatto con un reservoir a temperatura T . Considerando l'oscillatore all'equilibrio termico con distribuzione canonica, calcolare:

- 1) la sua energia media $\langle E \rangle$;
- 2) il valore ΔE dell'associato scarto quadratico medio (deviazione standard);
- 3) il comportamento limite di $\langle E \rangle$ e ΔE per $k_B T \ll \hbar\omega$ e $k_B T \gg \hbar\omega$.

[punteggio 6]

Esercizio ①

Dall'ipotesi

$$[\xi, [\xi, \eta]] = 0$$

abbiamo

$$\xi(\xi\eta - \eta\xi) = (\xi\eta - \eta\xi)\xi$$

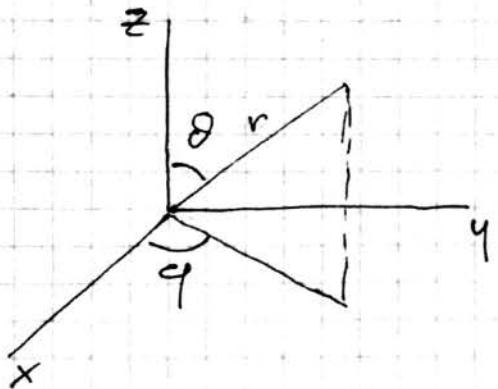
$$\xi^2\eta - \xi\eta\xi = \xi\eta\xi - \eta\xi^2$$

e quindi:

$$\xi^2\eta + \eta\xi^2 = 2\xi\eta\xi$$

Scambiando ξ con η otteniamo $\eta^2\xi + \xi\eta^2 = 2\xi\eta\xi$

Esercizio 2



$$x = r \sin \theta \cos \varphi$$

$$y = r \sin \theta \sin \varphi$$

$$z = r \cos \theta$$

Risulta

$$\begin{aligned} x^2 - y^2 &= r^2 \sin^2 \theta \cos^2 \varphi - r^2 \sin^2 \theta \sin^2 \varphi \\ &= r^2 \sin^2 \theta (\cos^2 \varphi - \sin^2 \varphi) \\ &= r^2 \sin^2 \theta \cos(2\varphi) \\ &= r^2 \left(\sin^2 \theta e^{i2\varphi} + \sin^2 \theta e^{-i2\varphi} \right) \frac{1}{2} \\ &= \frac{r^2}{2} \left(\sqrt{\frac{32\pi}{15}} Y_{22}(\theta, \varphi) + \sqrt{\frac{32\pi}{15}} Y_{2-2}(\theta, \varphi) \right) \end{aligned}$$

dove $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ sono le armiache sfeniche autofunzioni contemporanee di L^2 e L_z

$$L^2 Y_{lm}(\theta, \varphi) = \hbar^2 l(l+1) Y_{lm}(\theta, \varphi)$$

$$L_z Y_{lm}(\theta, \varphi) = \hbar m Y_{lm}(\theta, \varphi)$$

In definitiva

$$\psi(r) = \frac{r^2 f(r)}{\sqrt{\frac{32\pi}{15}}} \left(Y_{22}(\theta, \varphi) + Y_{2-2}(\theta, \varphi) \right)$$

In una misura di L_z possiamo trovare solo i valori $\pm 2\hbar$ e con uguali probabilità, $\frac{1}{2}$.

Misurando L^2 si può trovare solo il risultato $\hbar^2 2(2+1) = 6\hbar^2$

Esercizio 3

Sia $N \uparrow$ il numero di particelle con spin $\frac{1}{2}$
 e $N \downarrow$ il numero di quelle con spin $-\frac{1}{2}$. Risulta

$$N \uparrow + N \downarrow = N$$

$$M_z = (N \uparrow - N \downarrow) / 2$$

$$\text{e quindi } N \uparrow = \frac{N}{2} + M_z \quad N \downarrow = \frac{N}{2} - M_z$$

Il macrostato " M_z " è quindi il macrostato " $N \uparrow, N \downarrow$ "

$$N(M_z) = N(N \uparrow, N \downarrow) = \frac{N!}{N \uparrow! N \downarrow!} = \frac{N!}{\left(\frac{N}{2} + M_z\right)! \left(\frac{N}{2} - M_z\right)!}$$

Per $N \gg 1$ possiamo applicare la formula di Stirling

$$N! \approx \sqrt{2\pi N} N^{N+\frac{1}{2}} e^{-N} \quad \text{cioè} \quad \ln N! \approx N \ln N - N$$

$$\begin{aligned} \ln N(M_z) &= N \ln N - N \\ &\quad - \left(\frac{N}{2} + M_z \right) \ln \left(\frac{N}{2} + M_z \right) + \left(\frac{N}{2} + M_z \right) \\ &\quad - \left(\frac{N}{2} - M_z \right) \ln \left(\frac{N}{2} - M_z \right) + \left(\frac{N}{2} - M_z \right) \\ &= N \ln N - \left(\frac{N}{2} + M_z \right) \ln \left(\frac{N}{2} + M_z \right) \\ &\quad - \left(\frac{N}{2} - M_z \right) \ln \left(\frac{N}{2} - M_z \right) \end{aligned}$$

Poiché $N(M_z) \geq 1$ il massimo di $N(M_z)$ coincide con il massimo di $\ln N(M_z)$ e quindi il max si ha per

$$\frac{\partial}{\partial M_z} \ln(N(M_z)) = - \ln \left(\frac{N}{2} + M_z \right) + \ln \left(\frac{N}{2} - M_z \right) = \ln \left(\frac{\frac{N}{2} - M_z}{\frac{N}{2} + M_z} \right) = 0$$

$$\Rightarrow \frac{N}{2} - M_z = \frac{N}{2} + M_z \Rightarrow M_z = 0$$

$$\begin{aligned}
 \langle x \rangle &= \langle \psi | x | \psi \rangle \\
 &= \int_{-\infty}^{+\infty} \overline{\psi(x)} \times \psi(x) dx \\
 &= \int_{-\infty}^{+\infty} \times \sqrt{\frac{y^2}{\pi}} e^{-\frac{y^2 x^2}{2}} dx = 0
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \langle p \rangle &= \langle \psi | p | \psi \rangle \\
 &= \int_{-\infty}^{+\infty} \overline{\psi(x)} \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi(x) dx \\
 &= \int_{-\infty}^{+\infty} -i\hbar \sqrt{\frac{y^2}{\pi}} e^{-\frac{y^2 x^2}{2}} \left(-2x \frac{y^2}{\pi} e^{-\frac{y^2 x^2}{2}} \right) dx \\
 &= 0
 \end{aligned}$$

La funzione d'onda $\psi(x)$ soddisfa l'equazione

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + V(x) \psi(x) = E \psi(x)$$

da cui risulta

$$\begin{aligned}
 E - V(x) &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\psi''(x)}{\psi(x)} \\
 &= -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{d}{dx} \left(\frac{y^2}{\pi} \right)^{1/4} \left(-2x \frac{y^2}{\pi} e^{-\frac{y^2 x^2}{2}} \right) \right) \frac{1}{\psi(x)} \\
 &= \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{y^2}{\pi} \right)^{1/4} y^2 \left(\frac{d}{dx} \left(x e^{-\frac{y^2 x^2}{2}} \right) \right) \frac{1}{\psi(x)} \\
 &= \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{y^2}{\pi} \right)^{1/4} y^2 \left(1 - x^2 y^2 \right) e^{-\frac{y^2 x^2}{2}} \frac{1}{\left(\frac{y^2}{\pi} \right)^{1/4} e^{-\frac{y^2 x^2}{2}}} \\
 &= \frac{\hbar^2}{2m} y^2 - \frac{\hbar^2}{2m} y^4 x^2
 \end{aligned}$$

Poiché $E = \frac{\hbar^2 \omega^2}{2m}$ segue

$$V(x) = \frac{m}{2} \frac{\hbar^2 \omega^4}{m^2} x^2$$

Si tratta di un oscillatore armonico di pulsazione $\omega = \frac{\hbar \omega}{m}$

Esercizio (5)

Osserviamo che

$$S^2 = \underline{S} \cdot \underline{S} = (\underline{s}_1 + \underline{s}_2) \cdot (\underline{s}_1 + \underline{s}_2) = \underline{s}_1^2 + \underline{s}_2^2 + 2 \underline{s}_1 \cdot \underline{s}_2$$

in quanto $[\underline{s}_1, \underline{s}_2] = 0$, si ha

$$2 \underline{s}_1 \cdot \underline{s}_2 = S^2 - \underline{s}_1^2 - \underline{s}_2^2 = S^2 - \frac{3}{2}h^2 - \frac{3}{4}h^2$$

e quindi

$$H = a + \frac{4b}{h^2} \left(\frac{1}{2}S^2 - \frac{3}{4}h^2 \right) = a - 3b + \frac{2b}{h^2} S^2$$

Evidentemente le osservabili H , S^2 , S_z commutano mutuamente e perciò possono essere misurate contemporaneamente. In altre parole esiste una base di autovettori comuni di H, S^2, S_z . Tale base è quella dei vettori $|s, m, s_1, s_2\rangle$ che indicheremo brevemente con $|sm\rangle$ in quanto $s_1 = s_2 = \frac{1}{2}$ è fissato. In questa base H è diagonale, la matrice che lo rappresenta ha elementi

$$\langle s, m | H | s', m' \rangle = \left(a - 3b + \frac{2b}{h^2} h^2 s(s+1) \right) \delta_{ss'} \delta_{mm'}$$

I valori possibili di s sono gli interi compresi in $|s_1 - s_2| \leq s \leq |s_1 + s_2| = 1$ cioè $s=0$ e $s=1$

Per $s=0$ si può avere solo $m=0$ mentre per $s=1$ abbiamo $m=-1, 0, 1$

Esplcitamente la matrice è

$$|0,0\rangle \quad |1,-1\rangle \quad |1,0\rangle \quad |1,1\rangle$$

$$\begin{aligned} &|0,0\rangle \quad |a-3b \quad 0 \quad 0 \quad 0\} \\ &|1,-1\rangle \quad 0 \quad a+b \quad 0 \quad 0 \\ &|1,0\rangle \quad 0 \quad 0 \quad a+b \quad 0 \\ &|1,1\rangle \quad 0 \quad 0 \quad 0 \quad a+b \end{aligned}$$

gli autovettori sono
 $a-3b$ e $a+b$ con
 degenerazione 3

Anche il sistema di vettori $|s, m_1, m_2\rangle$ che per brevità
 indicheremo $|M_1, M_2\rangle$ con $m_1 = \pm \frac{1}{2}$, $m_2 = \pm \frac{1}{2}$
 costituisce una base dello spazio di Hilbert considerato.
 La relazione tra le due basi $|s, m\rangle$ e $|M_1, M_2\rangle$ è

$$|0,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle - |-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle \right) \quad \left. \right\} \text{ singolotto}$$

$$|1,-1\rangle = |-\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$$

$$|1,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle + |-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle \right) \quad \left. \right\} \text{ tripotto}$$

$$|1,1\rangle = |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle$$

Invertendo queste relazioni troviamo

$$|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle = |1,1\rangle$$

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

$$|-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|1,0\rangle - |0,0\rangle)$$

$$|-\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle = |1,-1\rangle$$

Da queste e dalla precedente rappresentazione
 di H nella base $|s, m\rangle$ troviamo la rappresentazione
 di H nella base $|M_1, M_2\rangle$

$$|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle, |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle, |-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle, |-\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$$

$$|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle \left(\begin{array}{cccc} a+b & 0 & 0 & 0 \\ 0 & a-b & 2b & 0 \\ 0 & 2b & a-b & 0 \\ 0 & 0 & 0 & a+b \end{array} \right)$$

$$|-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle$$

$$|-\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$$

Gli autovetori sono $a+b$ con molteplicità 2 e gli autovetori del minore

$$\begin{pmatrix} a-b & 2b \\ 2b & a-b \end{pmatrix} \quad (a-b-\lambda)^2 - 4b^2 = 0$$

$$a-b-\lambda = \pm 2b$$

$$\lambda = a-3b \quad \lambda = a+b$$

Riotturiamo quindi, come due, gli autovetori $a+b$ con molteplicità 3 e $a-3b$

Se $b < 0$ l'energia dello stato fondamentale di H
è $E_0 = a + b$ che ha degenerazione 3, gli autovalori
corrispondenti possono essere scelti come

$$|E_{0,1}\rangle = |1, -1\rangle \quad |E_{0,2}\rangle = |1, 0\rangle \quad |E_{0,3}\rangle = |1, 1\rangle$$

Si osservi che $H' = \varepsilon B \cdot (\hat{S}_1 + \hat{S}_2) = \varepsilon B(S_{1z} + S_{2z}) = \varepsilon B S_z$
è diagonale nelle basi $|s_m\rangle$ quindi gli autovalori
di $H + H'$ possono essere calcolati esattamente.

Per lo stato fondamentale abbiamo lo splitting di

$$E_{0,1} = a + b - \varepsilon B \hbar$$

$$E_{0,2} = a + b$$

$$E_{0,3} = a + b + \varepsilon B \hbar$$

che, come due, coincidono con i valori trovati al primo
ordine nella teoria delle perturbazioni con degenera.

Il livello $a - 3b$ di H non cambia per l'aggiunta di H'
in quanto autovalore con autofunzione $|0, 0\rangle$

Esercizio (6)

$$H = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 q^2$$

oscillatore classico

$$\begin{aligned} Z_1 &= \frac{1}{h} \int dq \int dp e^{-\beta H(q,p)} \\ &= \frac{1}{h} \int_{-\infty}^{+\infty} dp e^{-\frac{\beta p^2}{2m}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{1}{2} \beta m \omega^2 q^2} \\ &= \frac{1}{h} \sqrt{\frac{2\pi m}{\beta}} \sqrt{\frac{\pi}{\beta m \omega^2}} \\ &= \frac{1}{h} \frac{2\pi}{\beta \omega} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \langle E \rangle &= - \frac{\partial}{\partial \beta} \log Z_1 = - \frac{\partial}{\partial \beta} Z_1 / Z_1 \\ &= \frac{1}{\beta \omega} \omega = \frac{1}{\beta} = k_B T \end{aligned}$$

Stesso risultato del teorema di equipartizione

$$\begin{aligned} \langle E^2 \rangle &= \frac{1}{h} \int dq \int dp e^{-\beta H(q,p)} H(q,p)^2 \frac{1}{\int dq \int dp e^{-\beta H(q,p)}} \\ &= \frac{1}{Z_1} \frac{\partial^2}{\partial \beta^2} Z_1 \end{aligned}$$

$$\frac{\partial}{\partial \beta} Z_1 = \frac{1}{h} \frac{2\pi}{\omega} (-\beta^{-2})$$

$$\frac{\partial^2}{\partial \beta^2} Z_1 = \frac{1}{h} \frac{2\pi}{\omega} (+2\beta^{-3})$$

$$\langle E^2 \rangle = \cancel{\lambda} \frac{B \omega}{2\pi c} \frac{1}{\cancel{\lambda}} \frac{2\pi}{\omega} \frac{2}{\beta^3} = \frac{2}{\beta^2} = 2(k_B T)^2$$

$$\Delta E = \sqrt{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2}$$

$$= \sqrt{2(k_B T)^2 - (k_B T)^2} = k_B T$$

avendo considerato l'oscillatore come classico
ci troviamo sempre ($\hbar \tau$) nel caso $k_B T \gg \hbar \omega$ ($\hbar = 0$)

Non è possibile rispondere alle domande cose
succede se $k_B T \ll \hbar \omega$, pertanto occorre considerare
un oscillatore quantistico.

La funzione di partizione è

$$\begin{aligned}
 Z_1 &= \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\frac{En}{k_B T}} = \frac{1}{h} \sum_{n=0}^{\infty} e^{-(n+\frac{1}{2}) \frac{\hbar\omega}{k_B T}} \\
 &= e^{-\frac{\hbar\omega}{2k_B T}} \sum_{n=0}^{\infty} \left(e^{-\frac{\hbar\omega}{k_B T}} \right)^n \\
 &= e^{-\frac{\hbar\omega}{2k_B T}} \frac{1}{1 - e^{-\frac{\hbar\omega}{k_B T}}} \\
 &= \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega}{2k_B T}} - e^{-\frac{\hbar\omega}{2k_B T}}} = \frac{2}{\sinh\left(\frac{\hbar\omega}{2k_B T}\right)}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \langle E \rangle &= -\frac{\partial}{\partial \beta} \log Z_1 = -\frac{\partial}{\partial \beta} \log \left(\frac{2}{\sinh(\beta \hbar\omega/2)} \right) \\
 &= \frac{\partial}{\partial \beta} \log \left(\sinh(\beta \hbar\omega/2) \right) = \frac{\cosh(\beta \hbar\omega/2)}{\sinh(\beta \hbar\omega/2)} \frac{\hbar\omega}{2} \\
 &= \frac{\hbar\omega}{2} \frac{1}{\tanh(\beta \hbar\omega/2)}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \langle E^2 \rangle &= \frac{1}{Z_1} \frac{\partial^2}{\partial \beta^2} Z_1 \\
 &= \frac{1}{Z_1} \frac{\partial}{\partial \beta} \frac{-2 \cosh(\beta \hbar\omega/2)}{\sinh^2(\beta \hbar\omega/2)} \frac{\hbar\omega}{2} \\
 &= -\frac{\hbar\omega}{Z_1} \frac{\sinh^3(\beta \hbar\omega/2) - 2 \cosh(\beta \hbar\omega/2) \sinh(\beta \hbar\omega/2)}{\sinh^4(\beta \hbar\omega/2)} \\
 &= \left(\frac{\hbar\omega}{2} \right)^2 \left(2 \frac{\cosh^2(\beta \hbar\omega/2)}{\sinh^2(\beta \hbar\omega/2)} - 1 \right)
 \end{aligned}$$

$$\Delta E = \sqrt{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2}$$

$$= \frac{\hbar\omega}{2} \sqrt{\frac{2 \cosh^2(\beta\hbar\omega/2)}{\sinh^2(\beta\hbar\omega/2)} - 1 - \frac{\cosh^2(\beta\hbar\omega/2)}{\sinh^2(\beta\hbar\omega/2)}}$$

$$= \frac{\hbar\omega}{2} \sqrt{\frac{\cosh^2(\beta\hbar\omega/2) - \sinh^2(\beta\hbar\omega/2)}{\sinh^2(\beta\hbar\omega/2)}}$$

$$= \frac{\hbar\omega}{2} \frac{1}{\sinh(\beta\hbar\omega/2)}$$

Per $k_B T \ll \hbar\omega$ cioè $\beta\hbar\omega \gg 1$ abbiamo

$$\langle E \rangle \approx \frac{\hbar\omega}{2}$$

$$\Delta E \approx \frac{\hbar\omega}{2} \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega/2}} = \hbar\omega e^{-\frac{\hbar\omega}{2k_B T}}$$

Per $k_B T \gg \hbar\omega$ cioè $\beta\hbar\omega \ll 1$ abbiamo

$$\langle E \rangle \approx \frac{\hbar\omega}{2} \frac{1}{\beta\hbar\omega/2} = \frac{1}{\beta} = K_B T$$

$$\Delta E \approx \frac{\hbar\omega}{2} \frac{1}{\beta\hbar\omega/2} = \frac{1}{\beta} = K_B T$$