

Compitino 2 di Meccanica Quantistica (A-B)

31 Maggio 2018 - Università di Pisa

(tempo a disposizione: 2 ore)

Problema 1

Un sistema è descritto come un insieme di oscillatori (completamente indipendenti), ognuno costituito da un elettrone (carica $-e$ e massa m) legato ad un potenziale armonico (tridimensionale):

$$U(r) = \frac{1}{2}m\omega_0^2 r^2$$

Il sistema viene illuminato da un raggio di luce, con una distribuzione spettrale $I(\omega)d\omega$ con una distribuzione larga attorno ad ω_0 . La luce è linearmente polarizzata (si chiami x la direzione di polarizzazione). Si può supporre che tutti gli elettroni siano nello stato fondamentale al momento dell'irraggiamento.

Si calcoli il rate di assorbimento (per oscillatore) della luce in approssimazione di dipolo.

Problema 2

Si consideri un atomo di elio in una configurazione eccitata $1s2p$.

- Si scrivano i termini spettrali possibili ed i relativi multipletti di struttura fine.
- Si specifichi cosa è previsto per la separazione fra i livelli di struttura fine in accoppiamento di Russel-Saunders.
- Si dica quali sono le righe permesse (transizioni di dipolo elettrico) in approssimazione di Russel-Saunders fra i livelli energetici elencati sopra e il livello fondamentale, con configurazione $1s^2$.
- Sperimentalmente i livelli dell'elio non seguono la regola di Landè. Le interazioni spin-spin e spin-orbita che abbiamo trascurato possono essere espresse nella forma di due contributi alla Hamiltoniana, V_1, V_2 , della forma

$$V_1 = \alpha(r)\mathbf{L}\mathbf{S}; \quad V_2 = \beta(r) \left[\mathbf{s}_1 \cdot \mathbf{s}_2 - 3\frac{1}{r^2}(\mathbf{s}_1 \cdot \mathbf{r})(\mathbf{s}_2 \cdot \mathbf{r}) \right].$$

Quale di questi termini può provocare una correzione alla formula di Landè e perché?

Problema 3

Un protone di massa m è legato elasticamente ad un complesso molecolare, ai nostri scopi ci si può limitare a considerare un potenziale armonico della forma

$$U(r) = \frac{1}{2}m\omega^2 r^2$$

Il sistema è nello stato fondamentale.

Un fascio di neutroni viene inviato sul sistema. Si supponga che l'interazione neutrone-protone sia della forma

$$H_I = g\delta^{(3)}(\mathbf{r}_p - \mathbf{r}_n)$$

e si supponga che le masse di protone e neutrone siano uguali.

Si calcoli la sezione d'urto del processo elastico in approssimazione di Born.

Formule utili

Funzione d'onda per lo stato fondamentale di un oscillatore unidimensionale

$$\psi_0(x) = \frac{1}{\pi^{1/4}} \ell^{-1/2} \exp(-\frac{1}{2}x^2/\ell^2); \quad \ell^2 = \hbar/m\omega^2 \quad (1.1)$$

Trasformata di Fourier tridimensionale;

$$\int d^3\mathbf{x} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \exp(-\mathbf{x}^2/L^2) = \pi^{3/2} L^3 \exp(-\frac{1}{4}\mathbf{k}^2 L^2) \quad (1.2)$$

Soluzione problema 1

In approssimazione di dipolo l'interazione è $-\mathbf{d} \cdot \mathbf{E}$. In assorbimento per un'onda polarizzata lungo x e indicando con $\mathcal{E}(\omega)$ la componente di Fourier proporzionale a $\exp(-i\omega t)$, l'ampiezza di transizione per passare dallo stato fondamentale (0) ad uno stato eccitato (f) è

$$\mathcal{A}_{0 \rightarrow f} = e\mathcal{E}(\omega)\langle f|x|0\rangle \quad (1.3)$$

Gli autostati dell'oscillatore armonico sono individuati dalla terna (n_x, n_y, n_z) . Scrivendo

$$x = \frac{\ell}{\sqrt{2}}(a + a^\dagger); \quad \ell^2 = \frac{\hbar}{m\omega_0};$$

vediamo che l'unica transizione possibile è $(0, 0, 0) \rightarrow (1, 0, 0)$. Siccome le componenti y, z sono identiche fastato iniziale e finale possiamo limitarci alla parte in x ed indicare lo stato finale con $|1\rangle$, intendendo $n_x = 1$, quindi

$$\mathcal{A} = e\mathcal{E}(\omega)\langle 1|x|0\rangle = e\mathcal{E}(\omega)\frac{\ell}{\sqrt{2}} \quad (1.4)$$

La probabilità di assorbimento al secondo (*rate*) è data dalla regola di Fermi

$$d\mathcal{R} = \frac{2\pi}{\hbar}|\mathcal{A}|^2\delta(E_1 - E_0 - \hbar\omega) = \frac{2\pi}{\hbar^2}e^2\frac{\ell^2}{2}|\mathcal{E}(\omega)|^2\delta(\omega_0 - \omega) \quad (1.5)$$

Per connettere \mathcal{E} con l'intensità spettrale ricordiamo che l'intensità è connessa col campo elettrico dalla media temporale

$$I(\omega)d\omega = \frac{c}{4\pi}|\overline{\mathbf{E}}|^2; \quad \mathbf{E} = \mathcal{E}(\omega)e^{-i\omega t} + \mathcal{E}^*(\omega)e^{i\omega t}$$

quindi effettuando la media

$$|\mathcal{E}|^2 = \frac{2\pi}{c}I(\omega)d\omega$$

Sostituendo nella (1.5) ed integrando su ω :

$$\mathcal{R} = \frac{2\pi}{\hbar^2}e^2\frac{\ell^2}{2}\frac{2\pi}{c}I(\omega_0) = \frac{2\pi^2}{\hbar^2c}e^2\ell^2I(\omega_0) = \frac{2\pi^2}{\hbar}\alpha\ell^2I(\omega_0) \quad (1.6)$$

α è la costante di struttura fine (adimensionale). Per controllo dimensionale: $I(\omega)$ ha le dimensioni di una intensità per unit'a di frequenza

$$[I] = \frac{E}{L^2t}\frac{1}{\omega} = \frac{E}{L^2}$$

quindi correttamente

$$[\mathcal{R}] = \frac{1}{\hbar}E = \frac{1}{t}$$

Soluzione problema 2

a) Gli elettroni sono non equivalenti ed evidentemente il momento angolare totale è $\mathbf{L} = \boldsymbol{\ell}_1 + \boldsymbol{\ell}_2$, cioè $L = 1$. I termini spettrali sono quelli di singoletto ($S = 0$) e di tripletto ($S = 1$):

$${}^1P; {}^3P \quad (1.7)$$

Sommando L ed S per ottenere i possibili J si hanno i multipletti

$${}^1P_1; {}^3P_0, {}^3P_1, {}^3P_2 \quad (1.8)$$

b) Il primo termine non ha struttura fine. Per il secondo, in accoppiamento di Russel-Saunders: $V = A\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}$ che produce

$$\delta E_J = \frac{A}{2} (J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)) \quad (1.9)$$

e quindi per la differenza dei livelli

$$\delta E_J - \delta E_{J-1} = AJ \quad (1.10)$$

la nota regola di Landè.

c) Lo stato fondamentale ha untermine spettrale 1S . In accoppiamento di Russel-Saunders vale. fra l'altro, la regola di selezione $\Delta S = 0$ quindi l'unica transizione permessa di dipolo è

$${}^1P \rightarrow {}^1S$$

che si verifica immediatamente soddisfare anche le regole di selezione sulla parità, su L e su J .

d) Il termine in V_1 ha la stessa forma dell'usuale accoppiamento $L-S$ quindi al massimo può cambiare il coefficiente A nella (1.9), lasciando invariata la forma della regola di Landè.

Il termine in V_2 , usando $\mathbf{n} = \mathbf{r}/r$ è proporzionale a

$$\mathcal{O} = (s_1)_i (s_2)_j (\delta_{ij} - 3n_i n_j) = \left[(s_1)_i (s_2)_j - \frac{1}{3} \delta_{ij} \mathbf{s}_1 \cdot \mathbf{s}_2 \right] (\delta_{ij} - 3n_i n_j) \quad (1.11)$$

Il termine aggiunto nella prima parentesi non dà contributo essendo il tensore in n a traccia nulla. L'operatore \mathcal{O} come si vede è la contrazione di un tensore a traccia nulla per lo spin e di un tensore a traccia nulla per la parte orbitale, quindi per il teorema di W.E. i suoi elementi di matrice sono proporzionali a

$$(S_i S_j + S_j S_i - \frac{2}{3} \mathbf{S}^2 \delta_{ij}) (L_i L_j + L_j L_i - \frac{2}{3} \mathbf{L}^2 \delta_{ij})$$

che *non* è della forma $\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}$ e quindi non segue la regola di Landè.

Soluzione problema 3

Nel processo indicato (elastico) l'oscillatore resta nello stato fondamentale e la particella incidente passa da un impulso $\hbar\mathbf{k}$ ad un impulso $\hbar\mathbf{k}'$, in termini di stati, indicando anche lo stato dell'oscillatore

$$|0, \mathbf{k}\rangle \rightarrow |0, \mathbf{k}'\rangle$$

In approssimazione di Born l'ampiezza di scattering elastico è

$$f = -\frac{2\mu}{\hbar^2} \langle f|V|i\rangle$$

Notiamo che il protone è legato, quindi la massa ridotta del sistema è quella fra neutrone e massa (molto grande) del sistema molecolare che lega il protone, quindi $\mu = m_n = m$. Nel caso in esame, indicando con \mathbf{x} e \mathbf{y} le coordinate di protone e neutrone e con ψ la funzione d'onda dello stato fondamentale dell'oscillatore

$$\langle f|V|i\rangle = \int d\mathbf{x}d\mathbf{y}\psi^*(\mathbf{x})e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{y}}g\delta(\mathbf{x}-\mathbf{y})\psi(\mathbf{x})e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{y}} = g \int d\mathbf{x}|\psi(\mathbf{x})|^2 e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}} \quad (1.12)$$

con $\mathbf{q} = \mathbf{k}' - \mathbf{k}$. Per la funzione d'onda del fondamentale, usando $\ell^2 = \hbar/m\omega_0$:

$$|\psi(\mathbf{x})|^2 = \frac{1}{\pi^{3/2}} \frac{1}{\ell^3} \exp(-\mathbf{x}^2/\ell^2)$$

quindi usando la formula (1.2) data nel testo

$$\langle f|V|i\rangle = g \exp(-\frac{1}{4}\mathbf{q}^2\ell^2) \quad (1.13)$$

La sezione d'urto totale è data da

$$\sigma = \int |f|^2 d\Omega = \frac{4m^2 g^2}{\hbar^4} \int d\Omega e^{-\mathbf{q}^2\ell^2/2}$$

Notiamo che

$$\mathbf{q}^2 = 2k^2(1 - \cos\theta) \Rightarrow dq^2 = 2k^2 \sin\theta d\theta; \quad 0 \leq q^2 \leq 4k^2$$

quindi l'integrale sull'angolo solido si può riscrivere, integrando sull'angolo azimutale:

$$d\Omega \rightarrow 2\pi \sin\theta d\theta = \frac{\pi}{k^2} dq^2$$

quindi

$$\sigma = \frac{4m^2 g^2}{\hbar^4} \frac{\pi}{k^2} \int_0^{4k^2} dq^2 e^{-\frac{1}{2}q^2\ell^2} = \frac{8\pi m^2 g^2}{\hbar^4} \frac{1}{k^2\ell^2} (1 - e^{-2k^2\ell^2}) \quad (1.14)$$

Siccome $[g] = E L^3$ si verifica facilmente che la (1.14) ha le dimensioni corrette, cioè una lunghezza al quadrato.