

Esame di Meccanica Quantistica (A-B)

7 Febbraio 2019 - Università di Pisa

(tempo a disposizione: 2 ore)

Problema 1

Si consideri un atomo di elio, nella configurazione eccitata $1s2s$.

- 1) Si trascuri completamente l'interazione fra gli elettroni: qual è l'energia del livello corrispondente e la relativa degenerazione? Si tenga conto anche dello spin per rispondere alla seconda parte della domanda e si tenga conto del principio di Pauli.
- 2) In questa approssimazione è sempre vero che un autostato dell'Hamiltoniana è un autostato dello spin totale? (Si tenga anche conto del principio di Pauli)

Si schematizzi l'interazione fra gli elettroni nella forma

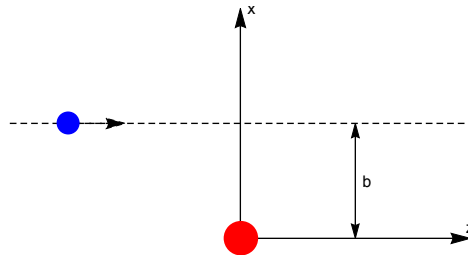
$$V = g\delta^{(3)}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2); \quad g > 0$$

dove $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2$ sono i vettori posizione dei due elettroni rispetto al nucleo.

- 3) Calcolare come si disintegra il livello energetico.
- 4) Usando il principio di Pauli si può dire qualcosa sullo spin totale dei livelli risultanti?

Problema 2

Una particella di massa m e carica e passa velocemente accanto ad un atomo. In prima approssimazione possiamo assumere che la particella esegua una traiettoria rettilinea, con parametro di impatto b (vedi figura). L'atomo è schematizzato come un oscillatore di frequenza angolare ω nello stato fondamentale.



Usando l'approssimazione di dipolo come si scrive la probabilità che l'atomo si trovi in uno stato eccitato dopo il passaggio della particella?

Non è richiesto di fare il calcolo dell'integrale finale sul tempo.

Suggerimento: si scriva il campo elettrico prodotto dalla particella nella posizione dell'atomo, chiamando $t = 0$ il tempo in cui la particella è alla minima distanza

Formule utili

Funzioni d'onda radiali per un atomo idrogenoide

$$R_{1s} = \left(\frac{a}{Z}\right)^{-\frac{3}{2}} 2 e^{-Zr/a}; \quad \left\{ \begin{array}{l} R_{2s} = \left(\frac{a}{Z}\right)^{-\frac{3}{2}} \frac{1}{\sqrt{2}} \left(1 - \frac{Zr}{2a}\right) e^{-\frac{Zr}{2a}}; \\ R_{2p} = \left(\frac{a}{Z}\right)^{-\frac{3}{2}} \frac{1}{2\sqrt{6}} \frac{Zr}{a} e^{-\frac{Zr}{2a}} \end{array} \right.$$

Tabella delle prime armoniche sferiche

$$Y_{0,0} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}, \quad Y_{1,0} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta, \quad Y_{1,\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{\pm i\phi}$$
$$Y_{2,0} = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3 \cos^2 \theta - 1), \quad Y_{2,\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \cos \theta \sin \theta e^{\pm i\phi}, \quad Y_{2,\pm 2} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \theta e^{\pm 2i\phi}.$$

Integrali angolari

$$\frac{1}{4\pi} \int d\Omega \begin{cases} \sin^2 \theta & = \frac{2}{3} \\ \cos^2 \theta & = \frac{1}{3} \end{cases} \quad \frac{1}{4\pi} \int d\Omega \begin{cases} \sin^4 \theta & = \frac{8}{15} \\ \cos^4 \theta & = \frac{1}{5} \end{cases}$$

Soluzione problema 1

1)

L'energia è

$$E = -\frac{Z^2}{2} \left(1 + \frac{1}{2^2}\right) \frac{e^2}{a_B} = -\frac{5}{8} Z^2 \frac{e^2}{a_B}$$

La degenerazione, senza tener conto del principio di Pauli è

$$\text{deg} = 2 \times 4 = 8$$

Il 4 è dovuto allo spin, il 2 al fatto che esistono due stati con la stessa energia

$$\Psi_a = \psi_{1s}(r_1)\psi_{2s}(r_2); \quad \Psi_b = \psi_{1s}(r_2)\psi_{2s}(r_1) \quad (1.1)$$

Le due combinazioni simmetrica e antisimmetrica

$$\Phi_+ = \frac{1}{\sqrt{2}}(\Psi_a + \Psi_b); \quad \Phi_- = \frac{1}{\sqrt{2}}(\Psi_a - \Psi_b) \quad (1.2)$$

per il principio di Pauli sono associate ad un singoletto di spin (uno stato) e ad un tripletto (3 stati) quindi tenendo conto del principio di Pauli la degenerazione si riduce a 4.

2)

No. Un qualunque stato

$$\alpha\Phi_+\chi_S + \beta\Phi_-\chi_T$$

(χ_S, T sono gli spinori) ha la stessa energia ma se α, β sono entrambi non nulli lo stato non è autostato dello spin totale.

3)

Occorre fare teoria perturbativa su un livello degenere. La cosa più semplice è usare la base Φ_+, Φ_- . Negli elementi di matrice della δ ovviamente lo stato antisimmetrico orbitale dà sempre risultato nullo, quindi lo stato di tripletto non si sposta e quello di singoletto subisce uno shift

$$\begin{aligned} \delta E &= \langle \Phi_+ | V | \Phi_+ \rangle = \frac{1}{2} \int d^3\mathbf{r}_1 d^3\mathbf{r}_2 \\ &\psi_{1s}(r_1)\psi_{2s}(r_2) (\psi_{1s}(r_1)\psi_{2s}(r_2) + \psi_{1s}(r_2)\psi_{2s}(r_1)) g\delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \\ &= g \int d^3\mathbf{r} \psi_{1s}(r)^2 \psi_{1s}(r)^2 = g \frac{1}{4\pi} \int_0^\infty r^2 dr R_{1s}^2 R_{2s}^2 = \frac{g}{4\pi} \frac{8}{81} \frac{Z^3}{a^3} \end{aligned}$$

4)

Il principio di Pauli impone, come già visto sopra, che il livello shiftato, corrispondente ad una funzione d'onda orbitale simmetrica, sia uno stato di singoletto di spin.

Soluzione problema 2

Il campo elettrico lungo l'asse z e lungo l'asse x sono rispettivamente, nella posizione dell'atomo

$$E_x = -e \frac{b}{(b^2 + x^2)^{3/2}} \rightarrow -e \frac{b}{(b^2 + (vt)^2)^{3/2}}$$

$$E_z = e \frac{vt}{(b^2 + x^2)^{3/2}} \rightarrow e \frac{vt}{(b^2 + (vt)^2)^{3/2}}$$

L'interazione è (x, z sono le coordinate dell'oscillatore, relative all'origine degli assi dove è situato l'atomo)

$$V = -exE_x - ezE_z$$

L'oscillatore quindi può passare solo ad uno stato eccitato per la coordinata x o z .

L'elemento di matrice di x (o z) fra uno stato eccitato ed il fondamentale vale (si usi la decomposizione in a, a^\dagger):

$$\langle 1, 0, 0 | x | 0, 0, 0 \rangle = \frac{\ell}{\sqrt{2}} = \langle 0, 0, 1 | x | 0, 0, 0 \rangle \quad \ell^2 = \hbar/m\omega$$

Per l'ampiezza di transizione quindi, ricordando che la differenza di energia fra lo stato eccitato e quello fondamentale è $\hbar\omega$ si ha, nei due casi

$$\mathcal{A}_x = \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} \langle 1, 0, 0 | -exE_x | 0, 0, 0 \rangle = \frac{i}{\hbar} e^2 b \frac{\ell}{\sqrt{2}} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} \frac{1}{(b^2 + (vt)^2)^{3/2}}$$

$$\mathcal{A}_z = \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} \langle 1, 0, 0 | -ezE_z | 0, 0, 0 \rangle = -\frac{i}{\hbar} e^2 \frac{\ell}{\sqrt{2}} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} \frac{vt}{(b^2 + (vt)^2)^{3/2}}$$

La probabilità richiesta si scrive

$$P = |\mathcal{A}_x|^2 + |\mathcal{A}_z|^2$$