Appello di Meccanica Quantistica II

Facoltà di Scienze, M.F.N., Università degli Studi di Pisa,
04 settembre 2009 (A.A. 08/09)
Tempo a disposizione: 3 ore.

Problemi

Si conderi la transizione $(n=3) \to (n=2)$ (corrispondente alla linea α della serie di Balmer) nell'atomo di idorogeno, posto in un campo esterno elettrico di quadrupolo debole: la perurbazione è data da

$$\Delta H = \mathcal{E} e^2 (3z^2 - \mathbf{r}^2) \ . \tag{1}$$

Si trascurino le strutture fine.

(i) Senza il campo elettrico (1) qual'è la lunghezza d'onda della linea in questione (in $\AA$).

(ii) Discutere in quanti sottolivelli (e con quale degenerazione ciascuno) si divide il livello $n=2$ di Bohr, in presenza della perturbazione (1). Calcolare i spostamenti dei livelli.

(iii) Nell'analisi del livello $n=3$ in teoria delle perturbazione, è necessario studiare i vari elementi di matrice $\langle \psi_{3,\ell,m} | \Delta H | \psi_{3,\ell',m'} \rangle$. Elencare tutti gli elementi di matrice ridotti non nulli, che appaiono nell'applicazione del teorema di Wigner-Eckart in questi (*N.B.*: qui si chiede solo di elemcarli, non calcolarli).

(iv) Determinare il rapporto

$$\frac{\langle \psi_{3,2,1} | \Delta H | \psi_{3,2,1} \rangle}{\langle \psi_{3,2,0} | \Delta H | \psi_{3,2,0} \rangle}$$

utilizzando il teorema di Wigner-Eckart, i.e., senza un calcolo esplicito degli elementi di matrice.

(v) Facendo il calcolo esplicito dell'elemento di matrice, $\langle \psi_{3,2,2} | \Delta H | \psi_{3,2,2} \rangle$, determinare uno degli elementi di matrice ridotti di cui al punto (iii).

N.B. La funzione radiale $R_{3,2}$ è data da (ponendo $r_B = 1$):

$$R_{3,2}(r) = \frac{2}{81} \sqrt{\frac{2}{15}}\, e^{-r/3}\, r^2 \ .$$

(vi)* In quanti sottolivelli si divide il livello $n=3$ e con quale grado di degenerazione per ciascuno?

(vii)* Dire quante linee spettrali si osserveranno corrispondenti alla transizioni $(n=3) \to (n=2)$ in approssimazione di dipolo, in presenza delle perturbazioni, Eq. (1). Dire quante linee si osserveranno se inoltre la luce viene emessa nella direzione $\mathbf{k} = (0,0,k)$?

*) Nel rispondere alle domande (vi) e (vii) potete assumere che non ci siano coincidenze accidentali per gli spostamenti del livelli, per vari sottolivelli.

Soluzione

Problemi

(i)

$$\lambda = \frac{9}{5}\frac{16\pi r_B}{\alpha} \simeq 6562\mathring{A}.$$

(ii) $n = 2$ è 4 volte degenere;

$$\psi_{2,1,1}, \quad \psi_{2,1,0}, \quad \psi_{2,1,-1}, \quad \psi_{2,0,0}.$$

ΔH è un tensore sferico

$$T_0^2$$

di parità positiva. Utilizzando il teorema di Wigner-Eckart e parità, si può vedere che gli unici elementi di matrice non nulli tra gli stati di $n = 2$ sono

$$\Delta E_{2,1,\pm1} = \langle 2,1,1|\Delta H|2,1,1\rangle = \langle 2,1,-1|\Delta H|2,1,-1\rangle, \qquad \Delta E_{2,1,0} = \langle 2,1,0|\Delta H|2,1,0\rangle,$$

mentre lo stato $|2,0,0\rangle$ non riceve correzione. Il livellosidivide in tre livelli uno dei quali doppiamente degenere. Le correzioni sono

$$\begin{aligned}\Delta E_{2,1,\pm1} &= \mathcal{E}e^2 \int_0^\infty dr\, r^2 R_{2,1}^2 r^2 \int d\cos\theta\, d\phi \frac{3}{8\pi} \sin^2\theta\,(3\cos^2\theta - 1) \\ &= -\mathcal{E}\,e^2\,30\,r_B^2 \frac{2}{5} = -12\mathcal{E}\,e^2\,r_B^2 \end{aligned} \tag{2}$$

$$\begin{aligned}\Delta E_{2,1,0} &= \mathcal{E}e^2 \int_0^\infty dr\, r^2 R_{2,1}^2 r^2 \int d\cos\theta\, d\phi \frac{3}{4\pi} \cos^2\theta\,(3\cos^2\theta - 1) \\ &= \mathcal{E}\,e^2\,30\,r_B^2 \frac{4}{5} = 24\mathcal{E}\,e^2\,r_B^2 \end{aligned} \tag{3}$$

(iii) Gli stati $n = 3$ sono

$$|3,2,\pm2\rangle, \quad |3,2,\pm1\rangle, \quad |3,2,0\rangle, \quad |3,1,\pm1\rangle, \quad |3,1,0\rangle, \quad |3,0,0\rangle.$$

Wigner-Eckart e parità danno luogo ai seguenti elementi di matrice non nulli,

$$\begin{aligned}
&\langle 3,2,2|\Delta H|3,2,2\rangle = \langle 3,2,-2|\Delta H|3,2,-2\rangle = \langle 3,2||T^2||3,2\rangle\langle 2,2|2,0;2,2\rangle;\\
&\langle 3,2,1|\Delta H|3,2,1\rangle = \langle 3,2,-1|\Delta H|3,2,-1\rangle = \langle 3,2||T^2||3,2\rangle\langle 2,1|2,0;2,1\rangle;\\
&\langle 3,2,0|\Delta H|3,2,0\rangle = \langle 3,2||T^2||3,2\rangle\langle 2,0|2,0;2,0\rangle;\\
&\langle 3,1,1|\Delta H|3,1,1\rangle = \langle 3,1,-1|\Delta H|3,1,-1\rangle = \langle 3,1||T^2||3,1\rangle\langle 1,1|2,0;1,1\rangle;\\
&\langle 3,1,0|\Delta H|3,1,0\rangle = \langle 3,1||T^2||3,1\rangle\langle 1,0|2,0;1,0\rangle;\\
&\langle 3,2,0|\Delta H|3,0,0\rangle = \langle 3,2||T^2||3,0\rangle\langle 2,0|2,0;0,0\rangle;\\
&\langle 3,0,0|\Delta H|3,2,0\rangle = \langle 3,0||T^2||3,2\rangle\langle 0,0|2,0;2,0\rangle,
\end{aligned} \tag{4}$$

dove abbiamo adottato la notazione

$$\langle J,M|j_1,m_1;j_2,m_2\rangle \equiv \langle j_1,j_2;J,M|j_1,m_1,j_2,m_2\rangle.$$

Gli elementi di matrice ridotti indipendenti sono quattro:

$$\langle 3,2||T^2||3,2\rangle, \quad \langle 3,1||T^2||3,1\rangle, \quad \langle 3,2||T^2||3,0\rangle, \quad \langle 3,0||T^2||3,2\rangle.$$

(iv)

$$\frac{\langle\psi_{3,2,1}|\Delta H|\psi_{3,2,1}\rangle}{\langle\psi_{3,2,0}|\Delta H|\psi_{3,2,0}\rangle} = \frac{\langle 2,1|2,0;2,1\rangle}{\langle 2,0|2,0;2,0\rangle} = \frac{-1/\sqrt{14}}{-\sqrt{2/7}} = \frac{1}{2}.$$

(v)

$$\begin{aligned}\langle\psi_{3,2,2}|\Delta H|\psi_{3,2,2}\rangle &= \mathcal{E}e^2\int dr\, r^4 R_{3,2}^2 \int d\cos\theta\, d\phi\, Y_{2,2}^*(3\cos^2\theta - 1)\\ = \quad \mathcal{E}e^2\, 126\, r_B^2\left(-\frac{4}{7}\right) &= -72\,\mathcal{E}\,e^2\, r_B^2. \end{aligned} \tag{5}$$

Ma questo è uguale a

$$\langle\psi_{3,2,2}|\Delta H|\psi_{3,2,2}\rangle = \langle 3,2||T^2||3,2\rangle\langle 2,2|2,0;2,2\rangle = \sqrt{\frac{2}{7}}\langle 3,2||T^2||3,2\rangle,$$

per cui si trova

$$\langle 3,2||T^2||3,2\rangle = -72\sqrt{\frac{7}{2}}\,\mathcal{E}\,e^2\, r_B^2.$$

(vi) Senza fare i calcoli espliciti,

$$\Delta E_{3,2,\pm 2};\quad \Delta E_{3,2,\pm 1};\quad \Delta E_{3,1,\pm 1};$$

danno luogo a 3 sottolivelli doppiamente degeneri,

$$\Delta E_{3,1,0},$$

da luogo a un singolo livello spostato; infine lo stato $|3,2,0\rangle$ e $|3,0,0\rangle$ mescolano e danno luogo a due sottolivelli spostati. In tutto $n = 3$ si divide in 6 sottolivelli di cui tre sono doppiamente degeneri.

(vii) Nove (Fig.1). Cinque se si osserva la luce nella direzione z o $-z$ (Fig.2). Nelle figure, le posizioni dei sottolivelli sono arbitrare.

È da notare che nel caso di transizioni nell'atomo di idrogeno, la regola di selezione è più forte che in generale, poiché dovuto alla parità, le transizioni avvengono solo tra gli stati di $\Delta L = L_f - L_i = \pm 1$, mentre in un atomo generico transizioni con $\Delta L = L_f - L_i = 0$ sono anche ammesse, tranne nei casi in qui $L_f = L_i = 0$.

Nel caso che si osserva la luce nella direzione z o $-z$, l'operatore di dipolo è

$$\varepsilon\cdot\mathbf{r} \propto T_1^1, T_{-1}^1,$$

perciò transizioni con $\Delta M = 0$ sono proibite.

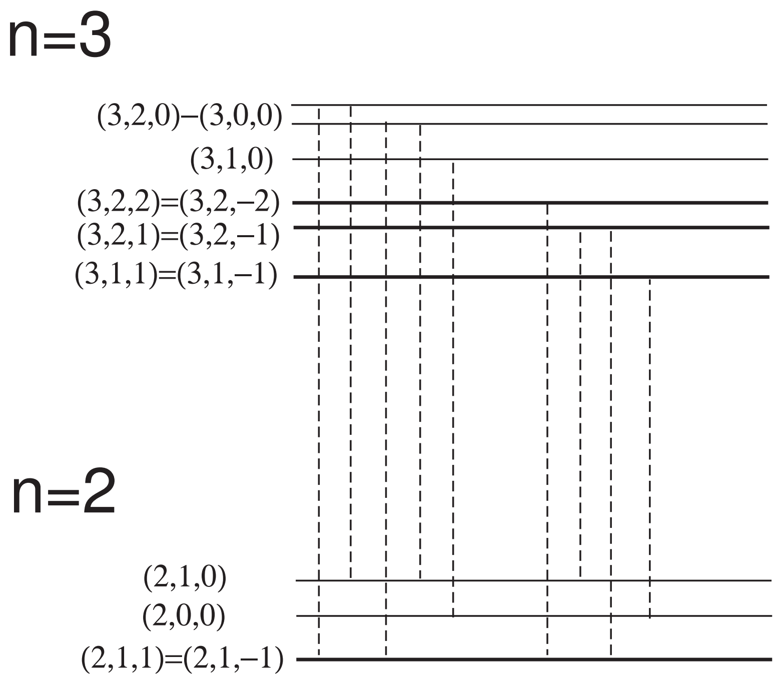

Figura 1:

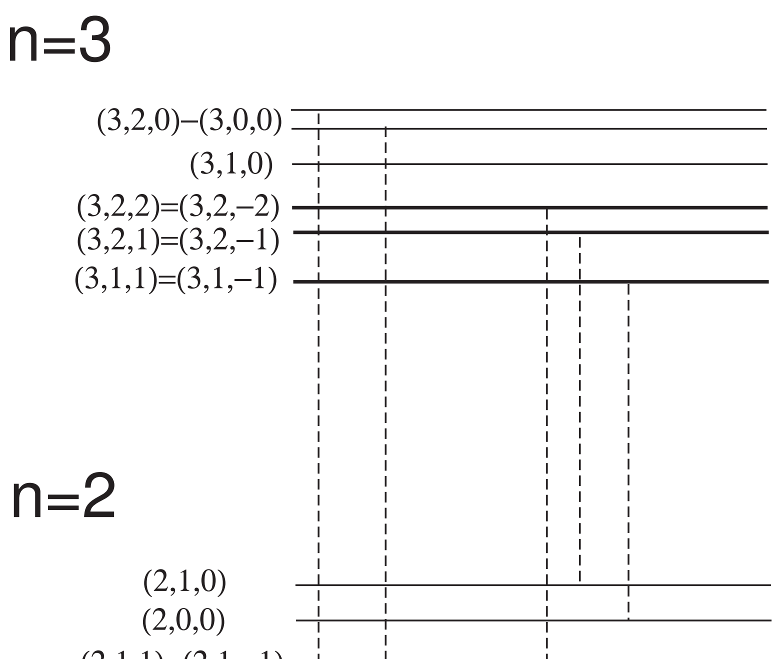

Figura 2: