Prova Scritta di Meccanica Quantistica II

Facoltà di Scienze, M.F.N., Università degli Studi di Pisa
11 gennaio 2012 (A.A. 11/12)

Tempo a disposizione: 3 ore

Problemi

Le prime correzioni relativistiche sull'atomo di idrogeno sono descritte dall'Hamiltoniana

$$\Delta H = -\frac{p^4}{8m^3c^2} + \frac{e^2\hbar^2}{2m^2c^2r^3}\,\mathbf{s}\cdot\mathbf{L} + \frac{e^2\hbar^2\pi}{2m^2c^2}\delta^3(r)\ . \tag{1}$$

(i) Facendo uso della teoria delle perturbazioni al primo ordine in ΔH, ma senza fare calcolo esplicito delle correzioni, dire in quanti sottolivelli si dividono il livello $n=3$ e il livello $n=2$. Determinare i numeri quantici e relativo grado di degenerazione per ciascun sottolivello;

(ii) Determinare il numero delle righe (la struttura fine della linea α di Balmer) di emissione di un fotone nella transizione $n=3 \to n=2$, in approssimazione di dipolo.

(iii) Dire quale colore ha la luce emessa nelle transizioni $n=3 \to n=2$ (linea α di Balmer, H_α).

(iv) Discutere l'origine del primo termine di H'.

(v) Calcolare le correzioni all'energia di ciascun sottolivello appartenente a $n=2$, esprimendola in funzione di $\alpha (= \frac{e^2}{\hbar c})$, e in unità di $\frac{e^2}{r_B}$.

Suggerimento: Nel considerare l'effetto del primo termine di ΔH, conviene scrivere $\mathbf{p}^2 = 2m\,(H_0 + \frac{e^2}{r})$, dove H_0 è l'Hamiltoniana dell'atomo di idrogeno non perturbata.

Formulario

$$r_B = \hbar^2/me^2 = 0.5291772 \cdot 10^{-8}\text{cm}; \qquad \alpha = e^2/\hbar c = 1/137.036.$$

The wave function of the generic (n, ℓ, m) state is

$$\psi_{n,\ell,m} = R_{n,\ell}(r)\, Y_{\ell,m}(\theta, \phi).$$

Funzioni radiali:

$$\begin{aligned}
R_{1,0}(r) &= 2\, r_B^{-3/2}\, e^{-r/r_B}\,, \\
R_{2,0}(r) &= \tfrac{1}{2\sqrt{2}}\, r_B^{-3/2} \left(2 - \frac{r}{r_B}\right) e^{-r/2r_B}\,, \\
R_{2,1}(r) &= \tfrac{1}{2\sqrt{6}}\, r_B^{-3/2}\, \frac{r}{r_B}\, e^{-r/2r_B}.
\end{aligned}$$

$$\int_0^\infty dt\, t^n\, e^{-t} = \Gamma(n+1) = n!\ .$$

$$\int_0^\infty dr\, \frac{1}{r}\, R_{n\ell}(r)^2 = \frac{1}{r_B^3 n^3\, \ell(\ell+\frac{1}{2})(\ell+1)}. \qquad (\ell \neq 0);$$

Armoniche sferiche:

$$\begin{aligned}
&Y_{0,0} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}, \\
&Y_{1,0} = \sqrt{\tfrac{3}{4\pi}}\, \cos\theta, \qquad & Y_{2,0} = \sqrt{\tfrac{5}{16\pi}}\, (3\cos^2\theta - 1), \\
&Y_{1,\pm 1} = \mp \sqrt{\tfrac{3}{8\pi}}\, \sin\theta\, e^{\pm i\phi}, \qquad & Y_{2,\pm 1} = \mp \sqrt{\tfrac{15}{8\pi}}\, \cos\theta\, \sin\theta\, e^{\pm i\phi}, \\
& & Y_{2,\pm 2} = \sqrt{\tfrac{15}{32\pi}}\, \sin^2\theta\, e^{\pm 2i\phi},
\end{aligned} \tag{2}$$

Soluzione

Problema

(i) Il livello $n = 3$ non perturbato è $2n^2 = 18$ volte degenere. H' commuta con $\mathbf{J}^2, J_i, \ell^2, s^2$, $\langle |H'| \rangle$ dipende solo da (ℓ, J), per cui i sottolivelli sono cinque, corrispondenti a stati:

$$(n,\ell,J) = (3,2,\frac{5}{2}), \quad (3,2,\frac{3}{2}), \quad (3,1,\frac{3}{2}), \quad (3,1,\frac{1}{2}), \quad (3,0,\frac{1}{2}), \tag{3}$$

con relativi gradi di degenerazione, 6, 4, 4, 2 e 2, rispettivamente, con totale 18 stati. Analogamente il livello $n = 2$ non perturbato è $2n^2 = 8$ volte degenere. I sottolivelli sono tre, corrispondenti a stati:

$$(n,\ell,J) = (2,1,\frac{3}{2}), \quad (2,1,\frac{1}{2}), \quad (2,0,\frac{1}{2})\,, \tag{4}$$

con relativi gradi di degenerazione, 4, 2 e 2, rispettivamente, con totale 8 stati.

(ii) Tenendo conto della regola di selezione, si hanno transizioni ammesse:

$$(3,2,\frac{5}{2}) \to (2,1,\frac{3}{2}), \quad (3,2,\frac{3}{2}) \to (2,1,\frac{3}{2}), \quad (3,2,\frac{3}{2}) \to (2,1,\frac{1}{2}), \quad (3,1,\frac{3}{2}) \to (2,0,\frac{1}{2}), \tag{5}$$

$$(3,1,\frac{1}{2}) \to (2,0,\frac{1}{2}), \quad (3,0,\frac{1}{2}), \to (2,1,\frac{3}{2}), \quad (3,0,\frac{1}{2}), \to (2,1,\frac{1}{2}), \tag{6}$$

per cui ci sono sette righe.

(iii) Rosso.

(iv) È il termine successivo nello sviluppo dell'energia relativistica in $1/c$

$$E = \sqrt{m^2c^4 + \mathbf{p}^2c^2} = mc^2 + \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \frac{\mathbf{p}^4}{8m^3c^2} + \dots \tag{7}$$

(v) Basta considerare i tre stati, (4). Per il termine spin-orbita

$$\langle n,\ell,s;J|H^{'}|n,\ell,s;J\rangle = \frac{e^2\hbar^2}{2m^2c^2}\,\frac{J(J+1)-\ell(\ell+1)-\frac{3}{4}}{2}\int dr\,\frac{1}{r}\,R_{n\ell}(r)^2 \tag{8}$$

ΔE è uguale a:

$$\Delta E^{so}_{2,1,3/2} = \frac{e^2\hbar^2}{2m^2c^2}\,\frac{1}{2}\int dr\,\frac{1}{r}\,R_{21}(r)^2 = \frac{e^2\hbar^2}{2m^2c^2}\,\frac{1}{r_B^3\,48} = \frac{\alpha^2}{96}\,\frac{e^2}{r_B}; \tag{9}$$

$$\Delta E^{so}_{2,1,1/2} = \frac{e^2\hbar^2}{2m^2c^2}\,(-1)\int dr\,\frac{1}{r}\,R_{21}(r)^2 = \frac{e^2\hbar^2}{2m^2c^2}\,(-1)\,\frac{1}{r_B^3\,24} = -\frac{\alpha^2}{48}\,\frac{e^2}{r_B}; \tag{10}$$

$$\Delta E^{so}_{2,0,1/2} = 0, \tag{11}$$

rispettivamente.

L'ultimo termine (termine di Darwin) contribuisce solo all'onda S,

$$\Delta E^{Darwin}_{2,0,1/2} = \frac{e^2\hbar^2\pi}{2m^2c^2}|\psi_{2,0,0}|^2 = \frac{e^2\hbar^2\pi}{2m^2c^2}\,\frac{1}{8\pi r_B^3} = \alpha^2\,\frac{e^2}{16r_B}. \tag{12}$$

Il primo termine può essere cacolato scrivendo

$$p^2 = 2m\,\frac{p^2}{2m} = 2m\,(H_0 + \frac{e^2}{r}),$$

dove H_0 è l'Hamiltoniana dell'atomo non perturbata.

$$\begin{aligned}(\Delta E)^{p4} &= -\frac{1}{8m^3c^2}\,4m^2\langle\psi_{2,\ell,m}|(H_0+\frac{e^2}{r})^2|\psi_{2,\ell,m}\rangle \\ &= -\frac{1}{2mc^2}\left[E_2^2 + 2E_2\,\langle\psi_{2,\ell,m}|\frac{e^2}{r}|\psi_{2,\ell,m}\rangle + e^4\langle\psi_{2,\ell,m}|\frac{1}{r^2}|\psi_{2,\ell,m}\rangle\right] \qquad (13)\end{aligned}$$

Per $(n,\ell) = (2,1)$

$$\langle\psi_{2,\ell,m}|\frac{1}{r}|\psi_{2,\ell,m}\rangle = \int dr\,r\,R_{2,1}^2 = \frac{1}{4r_B}$$

$$\langle\psi_{2,\ell,m}|\frac{1}{r^2}|\psi_{2,\ell,m}\rangle = \int dr\,R_{2,1}^2 = \frac{1}{12r_B^2}$$

$$(\Delta E)_{21}^{p4} = -\frac{1}{2mc^2}\left[\left(-\frac{e^2}{8r_B}\right)^2 + 2\left(-\frac{e^2}{8r_B}\right)\frac{e^2}{4r_B} + \frac{e^4}{12r_B^2}\right] = -\frac{7}{384}\alpha^2\frac{e^2}{r_B} \qquad (14)$$

Per $(n,\ell) = (2,0)$

$$\langle\psi_{2,\ell,m}|\frac{1}{r}|\psi_{2,\ell,m}\rangle = \int dr\,r\,R_{2,0}^2 = \frac{1}{4r_B}$$

$$\langle\psi_{2,\ell,m}|\frac{1}{r^2}|\psi_{2,\ell,m}\rangle = \int dr\,R_{2,0}^2 = \frac{1}{4r_B^2}$$

$$(\Delta E)_{20}^{p4} = -\frac{1}{2mc^2}\left[\left(-\frac{e^2}{8r_B}\right)^2 + 2\left(-\frac{e^2}{8r_B}\right)\frac{e^2}{4r_B} + \frac{e^4}{4r_B^2}\right] = -\frac{13}{128}\alpha^2\frac{e^2}{r_B} \qquad (15)$$

L'energia è data da:

$$E^{(2)} = -\frac{1}{2\cdot 4}\,\frac{e^2}{r_B} + \Delta E$$

dove per $(2,1,3/2)$:

$$\Delta E = (\Delta E)_{21}^{p4} + \Delta E_{2,1,3/2}^{so} = \alpha^2\frac{e^2}{r_B}(\frac{7}{384} + \frac{1}{96}) = \frac{11}{384}\alpha^2\frac{e^2}{r_B}\ ;$$

per $(2,1,1/2)$:

$$\Delta E = (\Delta E)_{21}^{p4} + \Delta E_{2,1,1/2}^{so} = \alpha^2\frac{e^2}{r_B}(-\frac{7}{384} - \frac{1}{48}) = -\frac{5}{128}\alpha^2\frac{e^2}{r_B}\ ;$$

per $(2,0,1/2)$:

$$\Delta E = (\Delta E)_{20}^{p4} + \Delta E_{2,0,1/2}^{Darwin} = \alpha^2\frac{e^2}{r_B}(-\frac{13}{128} + \frac{1}{16}) = -\frac{5}{128}\alpha^2\frac{e^2}{r_B}\ ,$$

le ultime dimostrano un esempio della nota degenerazione tra $nS_{1/2}$ e $nP_{1/2}$

$$\Delta E_{n,\ell,J} = -\frac{\alpha^2}{2n^3}\left[\frac{1}{J+1/2} - \frac{3}{4n}\right]\frac{e^2}{r_B}$$

che si elimina solo tenendo conto delle correzioni radiative (Lamb shift).