

Meccanica Quantistica - a.a. 2015/2016

Prova scritta 13 luglio 2016

Tempo a disposizione 3 ore

Problema 1

Si consideri un potenziale armonico tridimensionale

$$U(\mathbf{r}) = \frac{1}{2}k \mathbf{r}^2 \equiv \frac{1}{2}k(x^2 + y^2 + z^2) \quad (1)$$

Una particella di massa m e spin $1/2$ (elettrone) è intrappolata in questo potenziale:

- 1) Scrivere le energie, il momento angolare orbitale e la degenerazione (tenendo conto anche dello spin) dello stato fondamentale e del primo stato eccitato.
- 2) Si scrivano le funzioni d'onda radiali, normalizzate, per i primi due livelli.

Nel potenziale (1) sono ora immesse, in tutto, 4 particelle dello stesso tipo.

- 3) Trascurando l'interazione fra le particelle si scriva la configurazione elettronica del livello fondamentale, l'energia e la degenerazione. Si ricordi che le particelle sono identiche ed hanno spin $1/2$.
- 4) Ci si aspetta che l'interazione fra gli elettroni rimuova parte della degenerazione trovata al punto precedente: scrivere i termini spettrali possibili e controllare che la somma delle degenerazioni in questa nuova situazione sia uguale alla precedente. Si usi la solita notazione ^{2S+1}L per indicare i termini spettrali.
- 5) Per semplificare i calcoli si supponga che l'interazione sia della forma

$$V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = g \delta^3(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2); \quad g > 0 \quad (2)$$

e si consideri solo l'interazione fra gli elettroni dei gusci non completi.

- a) Esiste qualche termine spettrale su cui la perturbazione (2) non ha effetto? Cioè in cui non si produce spostamento nel livello di energia?
- b) Usando teoria delle perturbazioni al primo ordine si può decidere qual è il termine spettrale con energia minore? (Si tenga conto che $g > 0$).
- c) Si provi a calcolare l'effetto sul termine spettrale con L massimo, fra quelli individuati al punto 3). Si suggerisce di considerare lo stato con L_z massimo.

Problema 2

Una particella di massa m e carica e si muove in un potenziale armonico unidimensionale con frequenza ω :

$$U(x) = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \quad (3)$$

Il sistema viene investito da un'onda elettromagnetica e si vuole studiare cosa può succedere. Il problema è schematizzato come segue: al tempo $t \rightarrow -\infty$ la particella è nello stato fondamentale. La perturbazione è descritta da un campo elettrico variabile nel tempo

$$\mathcal{E}(t) = \mathcal{E}_0 e^{-|t|/\tau} \cos \omega_0 t \quad (4)$$

diretto lungo x . Si usi l'approssimazione di dipolo e la teoria delle perturbazioni al primo ordine.

- 1) In quali stati può trovarsi la particella a $t \rightarrow +\infty$?
- 2) Qual è l'ampiezza di probabilità per effettuare una transizione e la probabilità di trovare la particella nello stato fondamentale per $t \rightarrow \infty$? Ci si può limitare a scrivere l'espressione esplicita nel caso $\omega = \omega_0$.

Formule utili

Funzioni d'onda stazionarie per un oscillatore unidimensionale

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\pi^{1/4}} \frac{1}{\sqrt{\ell}} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n(x/\ell) \exp\left(-\frac{x^2}{2\ell^2}\right); \quad \ell \equiv \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$$

$$H_0(\xi) = 1; \quad H_1(\xi) = 2\xi; \quad H_2(\xi) = 4\xi^2 - 2.$$

$$\int_0^\infty e^{-x^2/\ell^2} x^2 dx = \frac{\sqrt{\pi}}{4} \ell^3; \quad \int_0^\infty e^{-x^2/\ell^2} x^4 dx = \frac{3}{8} \sqrt{\pi} \ell^5;$$

$$\int_0^\infty dx x^6 \exp\left(-\frac{2x^2}{\ell^2}\right) = \frac{15}{128} \ell^7 \sqrt{\frac{\pi}{2}}.$$

Armoniche sferiche

$$Y_{00} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}; \quad Y_{10}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta, \quad Y_{1,\pm 1}(\theta, \varphi) = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{\pm i\varphi}$$

$$\int \sin^4 \theta d\Omega = \frac{32}{15} \pi$$

Soluzioni

Problema 1

1) L'energia del fondamentale e del primo eccitato sono

$$E_0 = \frac{3}{2}\hbar\omega; \quad E_1 = \frac{5}{2}\hbar\omega; \quad \text{con: } \omega = \sqrt{\frac{k}{m}}. \quad (5)$$

Per la degenerazione, notando che il sistema è identico a quello di tre oscillatori unidimensionali si ha una degenerazione orbitale $(1, 3)$ e, tenendo conto dello spin: $g_0 = 2$; $g_1 = 2 \times 3 = 6$, g_i indica la degenerazione.

Siccome la funzione d'onda dello stato fondamentale è invariante sotto rotazioni e le funzioni d'onda del livello eccitato sono polinomi di grado 1 per esponentziali in r^2 il momento angolare è rispettivamente 0, 1.

2) Dalla forma delle autofunzioni dell'oscillatore unidimensionale

$$R_{1s}(r) = A_{1s} e^{-r^2/2\ell^2}; \quad R_{1p} = A_{1p} r e^{-r^2/2\ell^2}$$

La condizione di normalizzazione

$$\int_0^\infty r^2 dr R^2(r) = 1$$

fissa le costanti (vedi elenco integrali):

$$A_{1s} = 2\pi^{-1/4} \ell^{-3/2}; \quad A_{1p} = \sqrt{\frac{8}{3}} \pi^{-1/4} \ell^{-5/2}$$

3) Usiamo per gli orbitali la notazione $n\ell$ dove $n = 1, 2, \dots$ elenca per ogni ℓ la presenza della corrispondente controparte radiale (cioè $n - 1$ è il numero quantico radiale). Gli orbitali descritti al punto precedente sono quindi in questa notazione $1s$ e $1p$. La configurazione elettronica fondamentale che non viola il principio di Pauli è quindi

$$1s^2 1p^2.$$

L'energia è la somma delle energie degli orbitali, avendo trascurato l'interazione elettrone-elettrone, quindi

$$E_{orb} = 2 \times E_0 + 2 \times E_1 = 8 \hbar \omega$$

Il guscio s è completo, nel guscio p possono trovare posto 6 elettroni e ne sono presenti 2 quindi la degenerazione è

$$deg. = \binom{6}{2} = 15.$$

4) Occorre vedere le configurazioni possibili per due elettroni p equivalenti, è un caso identico a quello dell'atomo di carbonio. Lo spin totale può essere $S = 0, 1$, rispettivamente antisimmetrico e simmetrico. La composizione dei due momenti orbitali può dar luogo a $L = 0, 1, 2$, le funzioni d'onda con $L = 1$ sono antisimmetriche orbitalmente, negli altri due casi simmetriche. Quindi tenendo conto del principio di Pauli i termini spettrali possibili sono

$$^3P; \quad ^1S; \quad ^1D$$

La degenerazione totale è (viene scritto $(2S + 1)(2L + 1)$ per ogni termine spettrale):

$$3 \times 3 + 1 \times 1 + 1 \times 5 = 15$$

in accordo con quanto trovato prima.

5a) L'interazione agisce solo sulle variabili orbitali, commuta con \mathbf{L}, \mathbf{S} quindi la classificazione precedente dà dei buoni numeri quantici per la classificazione dei livelli. Per una data funzione d'onda $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ l'effetto della perturbazione provoca uno shift del livello pari a

$$\Delta E = \int d^3\mathbf{r}_1 \int d^3\mathbf{r}_2 \psi^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) g \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = g \int d^3\mathbf{r} |\psi(\mathbf{r}, \mathbf{r})|^2 \quad (6)$$

L'effetto della perturbazione è quindi nullo sui livelli orbitalmente antisimmetrici, cioè sul termine spettrale 3P .

5b) Dalla (6), siccome $g > 0$, segue che gli spostamenti in energia per gli stati orbitalmente simmetrici sono positivi, quindi il termine spettrale fondamentale è il 3P .

5c) Per $L_z = 2$ si ha una funzione d'onda

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = R_{1p}(r_1)Y_{11}(\Omega_1)Y_{11}(\Omega_2)$$

quindi

$$\begin{aligned} \Delta E &= g \int_0^\infty r^2 dr R_{1p}^4(r) \int d\Omega |Y_{11}(\theta\varphi)|^4 = g \int_0^\infty r^2 dr R_{1p}^4(r) \frac{3}{8\pi} \sin^4 \theta d\Omega \\ &= g \frac{5}{6} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \ell^{-3} \left(\frac{3}{8\pi} \right)^2 \frac{32}{15} \pi = \frac{g}{\ell^3} \frac{1}{2(2\pi)^{3/2}} \cdot \quad (7) \end{aligned}$$

Problema 2

1) Le regole di transizione per il dipolo in un oscillatore armonico implicano che la particella può trovarsi, se la transizione ha effetto, solo nello stato $n = 1$. Quindi gli stati finali possibili sono $|0\rangle$, se la transizione non avviene, e $|1\rangle$ se la transizione avviene.

2) Per quanto detto al punto precedente la probabilità di ritrovare la particella nello stato fondamentale è, all'ordine perturbativo più basso:

$$P_{0 \rightarrow 0} = 1 - P_{0 \rightarrow 1} \quad (8)$$

L'ampiezza di probabilità per la transizione $0 \rightarrow 1$ è data dalla formula generale

$$\mathcal{A} = \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i(E_f - E_i)t/\hbar} V_{fi}(t) dt = \frac{1}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega t} V_{fi}(t) dt \quad (9)$$

L'interazione è

$$V = -ex\mathcal{E}(t)$$

ed usando

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

segue

$$V_{fi}(t) = -e\ell \frac{1}{\sqrt{2}} \mathcal{E}(t)$$

e sostituendo nella (9)

$$\mathcal{A} = -\frac{e\ell}{i\hbar\sqrt{2}} \mathcal{E}_0 \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega t} \cos(\omega_0 t) e^{-|t|/\tau} dt \quad (10)$$

L'integrale si esegue immediatamente dividendo l'intervallo in $-\infty, 0$ e $0, \infty$ dando luogo a

$$\mathcal{A} = -\frac{e\ell\tau}{i\hbar\sqrt{2}} \mathcal{E}_0 \left[\frac{1}{1 + (\omega + \omega_0)^2 \tau^2} + \frac{1}{1 + (\omega - \omega_0)^2 \tau^2} \right] \quad (11)$$

Per $\omega = \omega_0$ l'espressione si semplifica in

$$\mathcal{A} = i \frac{e\ell}{\hbar} \mathcal{E}_0 \sqrt{2} \tau \frac{1 + 2\tau^2 \omega_0^2}{1 + 4\tau^2 \omega_0^2} \quad (12)$$

Si ha perciò

$$P_{0 \rightarrow 1} = \frac{e^2 \ell^2}{\hbar^2} 2\mathcal{E}_0^2 \tau^2 \left(\frac{1 + 2\tau^2 \omega_0^2}{1 + 4\tau^2 \omega_0^2} \right)^2 \quad (13)$$