

Prova Scritta di Meccanica Quantistica II

Facoltà di Scienze, M.F.N., Università degli Studi di Pisa
29 giugno 2010 (A.A. 09/10)

Tempo a disposizione: 3 ore

Problema

Si consideri un atomo di silicio (*Si*, il numero atomico 14) nello stato fondamentale.

- (i) Determinare la configurazione elettronica.
- (ii) Spiegare l'origine (ragione fisica) della regola di Hund ¹.
- (iii) Utilizzando la detta regola di Hund determinare il multipletto (i valori (S, L)) cui appartiene lo stato fondamentale di silicio.
- (iv) Consideriamo l'effetto di spin-orbita e l'effetto di un campo magnetico esterno uniforme $\mathbf{B} = (0, 0, B)$ contemporaneamente come perturbazione:

$$H' = A \mathbf{L} \cdot \mathbf{S} + \hbar \omega_L (2S_z + L_z), \quad \hbar \omega_L = |\mu_B|B = \frac{|e|\hbar B}{2mc} \quad (1)$$

Dire qual'è il segno di A per l'atomo di silicio, e spiegare perché.

Potete usare il fatto che il termine spin-orbita (il primo termine della (1)) deriva da

$$H_{LS} = \sum_i \frac{e}{2m^2c^2} \frac{1}{r_i} \frac{dV_i}{dr} \mathbf{s}_i \cdot (\mathbf{r}_i \times \mathbf{p}_i) \equiv \sum_i A_i(r) \boldsymbol{\ell}_i \cdot \mathbf{s}_i, \quad (2)$$

dove V_i è il potenziale centrale per l' i -simo elettrone, $e(< 0)$ è la carica elettrica dell'elettrone, prendendo il valor medio sugli stati del multipletto.

- (v) Determinare lo spettro dei sottolivelli (i.e. la correzione dovuta a H'), nei seguenti casi:
 - (a) Per $B = 0$;
 - (b) Per (un ipotetico caso) $A = 0$.

Determinare l'energia dello stato fondamentale nei due casi:

- (c) Per $A \neq 0$, $B \neq 0$, ma con un campo magnetico debole ($\hbar \omega_L \ll A$);
- (d) Per $A \neq 0$, $B \neq 0$, ma con un campo magnetico forte ($\hbar \omega_L \gg A$).

Nota: Negli ultimi due punti considerate uno dei termini della (1) come perturbazione ancora più piccola, al sistema definito dal resto dell'Hamiltoniana, e trovate il risultato al primo ordine in cui la correzione risulti non nulla.

¹La regola empirica di Hund asserisce che tra i multipletti (S, L) formati dagli elettroni equivalenti (quando c'e' un solo strato parzialmente occupato), lo stato fondamentale dell'atomo appartiene al multipletto con S massimo possibile e, tra di essi, quello con L massimo, se ci sono più di un multipletto con $S = S_{max}$.

Formulario

Coefficienti di Clebsch-Gordan (e.g. $-2/3$ va letto come $-\sqrt{2/3}$)

$j_1 \otimes j_2$	J_1	J_2	\dots
	M_1	M_2	\dots
m_1	m_2	C-G	
m_3	m_4	coefficients	
\dots	\dots		

Figure 1:

$1 \otimes 1$	2	2	1	
+1	+2	+1	+1	+1
+1	0	1/2	1/2	2 1 0
0	+1	1/2	-1/2	0 0 0
		+1	-1	1/6 1/2 1/3
		0	0	2/3 0 -1/3
		-1	+1	1/6 -1/2 1/3
				2 1
				-1 -1
				0 -1
				1/2 1/2 2
				-1/2 -1/2 -2
				-1 -1 1

Figure 2:

Operatori $J_{\pm} = J_1 \pm iJ_2$

$$\begin{aligned}
 J_- |j, m\rangle &= \sqrt{(j+m)(j-m+1)} |j, m-1\rangle, \\
 J_+ |j, m\rangle &= \sqrt{(j-m)(j+m+1)} |j, m+1\rangle, \\
 \mathbf{L} \cdot \mathbf{S} &= \frac{1}{2}(L_+ S_- + L_- S_+) + L_z S_z. \tag{3}
 \end{aligned}$$

Teoria delle perturbazioni al secondo ordine

$$E_n^{(2)} = \sum_k' \frac{|H'_{nk}|^2}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}$$

Soluzione

Problema

(i)

$$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^2 . \quad (4)$$

- (ii) Le interazioni elettrostatiche tra gli elettroni equivalenti sono le più ripulsive (l'energia maggiore), più grande è la sovrapposizione tra le funzioni d'onda orbitale. Tra i possibili multipletti quello con S massimo corrisponde ad una funzione d'onda di spin massimamente simmetrica; segue che la funzione d'onda orbitale è massimamente antisimmetrica, che implica le distribuzioni orbitali con meno sovrapposizioni spaziali tra gli elettroni. Lo stesso motivo spiega anche la seconda parte della regola.

(ii)

$$(L, S) = (1, 1) . \quad (5)$$

(iii)

$$A > 0 , \quad (6)$$

poiché lo strato incompleto ($3p$) è occupato meno della metà. Questa regola si ottiene come segue. Per lo stato fondamentale, S è massimo. Nel caso presente i due elettroni sono nello stato simmetrico rispetto allo spin, per cui

$$\sum_i \ell_i \cdot \mathbf{s}_i \rightarrow \frac{1}{2} \sum_i \ell_i \cdot \mathbf{S} = \frac{1}{2} \mathbf{L} \cdot \mathbf{S} . \quad (7)$$

La regola segue allora poiché

$$e < 0, \quad \frac{dV_i}{dr} < 0 .$$

- (iv) (a) Per $B = 0$ la perturbazione è

$$\frac{A}{2} (\mathbf{J}^2 - \mathbf{L}^2 - \mathbf{S}^2) = \frac{A}{2} [J(J+1) - 4] .$$

Sono diagonali (J, J_z) quindi gli stati stazionali corrispondono a $J = 2$ (5 volte degenero), $J = 1$ (3 volte degenero), e $J = 0$ (singolo). L'energia è data da A , $-A$ e $-2A$, rispettivamente.

- (b) Per $A = 0$ lo spettro è definito dal secondo termine: gli stati stazionali sono gli autostati di L_z, S_z (Tabella).
- (c) Per il campo magnetico debole ma non nullo, trattiamo l'ultimo termine come perturbazione al sistema con (J, J_z, L, S) definiti. Lo stato fondamentale “non-perturbato” è lo stato $J = 0$ (con l'energia non perturbata $-2A$):

$$|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} (|1, -1\rangle - |0, 0\rangle + |-1, 1\rangle) ,$$

stati	L_z	S_z	$E/\omega_L \hbar = L_z + 2S_z$
$ 1\rangle$	1	1	3
$ 2\rangle$	1	0	1
$ 3\rangle$	1	-1	-1
$ 4\rangle$	0	1	2
$ 5\rangle$	0	0	0
$ 6\rangle$	0	-1	-2
$ 7\rangle$	-1	1	1
$ 8\rangle$	-1	0	-1
$ 9\rangle$	-1	-1	-3

Table 1: I livelli di energia per $A = 0$.

dove $|L_z, S_z\rangle = |1, -1\rangle$, etc sono gli stati di (L_z, S_z) definiti. La correzione al primo ordine si annulla:

$$\Delta E = \langle 0 | \hbar \omega_L (2S_z + L_z) | 0 \rangle = 0.$$

Occorre andare al secondo ordine, utilizzando la formula

$$\Delta E^{(2)} = \sum_{k \neq 0} \frac{|(\Delta H)_{k0}|^2}{E_0 - E_k}.$$

Visto che la perturbazione commuta con J_z , gli stati intermedii da tenere conto sono

$$|J, J_z\rangle = |1, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|1, -1\rangle - |-1, 1\rangle); \quad |2, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}} |1, -1\rangle + \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} |0, 0\rangle + \frac{1}{\sqrt{6}} |-1, 1\rangle;$$

con energia $-A$ e A , ripetutivamente. Soltanto lo stato $|k\rangle = |1, 0\rangle$ contribuisce:

$$\Delta E^{(2)} = \frac{|-2\hbar\omega_L/\sqrt{6}|^2}{-2A + A} = -\frac{2\hbar^2\omega_L^2}{3A},$$

l'energia è data da

$$E \simeq -2A - \frac{2\hbar^2\omega_L^2}{3A}.$$

- (d) Nella situazione opposta, lo stato fondamentale non perturbato è $|9\rangle = |L_z, S_z\rangle = |-1, -1\rangle$, e la perturbazione è data da

$$\Delta H = \frac{A}{2} (L_+ S_- + L_- S_+) + L_z S_z.$$

La correzione al primo ordine è non nulla ed è data da

$$\Delta E^{(1)} = \langle -1, -1 | \frac{A}{2} (L_+ S_- + L_- S_+) + L_z S_z | -1, -1 \rangle = A.$$

per cui

$$E \simeq -3\omega_L \hbar + A.$$