Appello di Meccanica Quantistica II

Facoltà di Scienze, M.F.N., Università degli Studi di Pisa,
30 gennaio 2009 (A.A. 08/09)

Tempo a disposizione: 3 ore.

Problema

Un atomo di idrogeno nello stato fondamentale è sottoposto, a partire dall'istante $t = 0$, ad un campo elettrico omogeneo debole dipendente dal tempo. L'Hamiltoniana di perturbazione è

$$H' = e\varepsilon(t)y; \qquad \varepsilon(t) = -iE_0\, e^{i\omega t} + h.c. \tag{1}$$

dove E_0, ω sono costanti. Si vuole studiare l'ionizzazione in un trattamento approssimativo.

(i) In teoria delle perturbazioni, e utilizzando il teorema di Wigner-Eckart, determinare la distribuzione angolare dell'elettrone nello stato finale.

(ii) Determinare la condizione sulla frequenza ω affinché avvenga l'ionizzazione.

(iii) Calcolare la probabilità di ionizzazione (per un intervallo unitario di tempo), utilizzando la regola di Fermi e *approssimando* gli stati finali con le onde piane,

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = L^{-3/2} \exp i\,\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}; \quad E_k = \frac{\mathbf{k}^2\hbar^2}{2m}. \tag{2}$$

θ, ϕ rappresentano la direzione di $\mathbf{k}$.

(iv) Spiegare perché l'uso delle onde piane (2) per gli stati finali rappresenta un'approssimazione (i.e. oltre ad essere un'approssimazione al primo ordine della teoria delle perrturbazioni).

Potete usare la formula

$$\rho(k) = \frac{mL^3}{8\pi^3\hbar^2} k \sin\theta d\theta d\phi, \tag{3}$$

per la densità di stati tra E_k e $E_k + \Delta E_k$, dove L è il lato di una scatola grande in cui tutto il sistema è contenuto.

Soluzione

Problema 1.

(i) Secondo la regola d'oro di Fermi, la probabilità di transizione per unità di tempo è data da:

$$w_{fi} = \frac{2\pi}{\hbar}|F_{fi}|^2\rho(E_f)|_{E_f=E_i+\omega\hbar},$$

dove

$$F_{fi} = \langle \mathbf{k}| - \frac{eE_0 y}{i}|100\rangle.$$

Per il teorema di Wigner-Eckart, lo stato finale è in uno stato di momento angolare, $\propto T_y \propto Y_{1,1} + Y_{1,-1}$,

$$\frac{Y_{1,1}+Y_{1,-1}}{\sqrt{2}} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\sin\theta\sin\phi :$$

la distribuzione angolare dell'elettrone è

$$d\theta\sin\theta\, d\phi\,\frac{3}{4\pi}\sin^2\theta\sin^2\phi.$$

che è correttamente normalizzata:

$$\int_0^{\pi} d\theta \int_0^{2\pi} d\phi\,\sin\theta\,\frac{3}{4\pi}\sin^2\theta\sin^2\phi = 1.$$

(ii) Dalla conservazione dell'energia si ha

$$\frac{k^2\hbar^2}{2m} + \frac{me^4}{2\hbar^2} = \omega\hbar.$$

Perciò la condizione richiesta è:

$$\omega\hbar > \frac{me^4}{2\hbar^2}.$$

(iii) Questo elemento di matrice si calcola come segue:

$$F_{fi} = -\frac{eE_0}{i}L^{-3/2}\frac{2r_B^{-3/2}}{\sqrt{4\pi}}\int d^3r\, e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} y\, e^{-r/r_B} = -\frac{2eE_0L^{-3/2}r_B^{-3/2}}{\sqrt{4\pi}i}(i\frac{\partial}{\partial k_y})I(k); \quad (4)$$

$$I(k) = \int d^3r\, e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} e^{-r/r_B}, \quad (5)$$

dove $r_B = \hbar^2/me^2$ è il raggio di Bohr. L'integrale $I(k)$ può essere calcolato facilmente in coordinate sferiche:

$$I = 2\pi r_B^3 \int_0^{\infty} dr\, r^2 \int_0^{\pi} d(\cos\theta)\, e^{-r+i(kr_B)r\cos\theta} = \frac{8\pi r_B^3}{(1+k^2r_B^2)^2.}$$

Ora,

$$\frac{\partial}{\partial k_y}I(k) = -\frac{32\pi r_B^5 k_y}{(1+k^2r_B^2)^3},$$

quindi

$$F_{fi} = \frac{2eE_0L^{-3/2}r_B^{-3/2}}{\sqrt{4\pi}}\,\frac{32\pi r_B^5 k\sin\theta\sin\phi}{(1+k^2r_B^2)^3} \quad (6)$$

$$= \frac{32\pi^{1/2}eE_0 r_B^{7/2} k\sin\theta\sin\phi}{L^{3/2}(1+k^2r_B^2)^3}. \quad (7)$$

La probabilità d'ionizzazione (per unità di tempo) è dunque data da

$$w_{fi} = \int\int d\theta d\phi \frac{2\pi}{\hbar} \frac{32^2 \pi e^2 E_0^2 r_B^7 k^2 \sin^2\theta \sin^2\phi}{(1+k^2 r_B^2)^6} \frac{m}{8\pi^3 \hbar^2} k \sin\theta \tag{8}$$

$$= \frac{1024\, m e^2 E_0^2 r_B^7 k^3}{3\hbar^3 (1+k^2 r_B^2)^6}, \tag{9}$$

dove k è determinato dalla condizione di conservazione d'energia,

$$\frac{k^2\hbar^2}{2m} + \frac{me^4}{2\hbar^2} = \omega\hbar.$$

È da notare che la distribuzione angolare dell'elettrone emesso,

$$\sin^2\theta \sin^2\phi \, d\Omega$$

riflette la direzione del campo elettrico applicato.

(iv) Le onde piane (2) non sono ortogonali alle funzioni d'onda degli stati legati, perciò non rappresentano le corrette funzioni d'onda del continuo. Per

$$k\, r_B \gg 1,$$

tuttavia, l'approssimazione deve essere ragionevole, visto che la sovrapposizione tra la funzione d'onda dello stato legato e l'onda piana (l'integrale $I(k)$) può essere arbitrariamente piccola.