Appello di Meccanica Quantistica II

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

Tempo a disposizione: 3 ore.

Problema 1.

Un atomo di idrogeno è sottoposto a un campo elettrico debole ed inomogeneo, $\mathbf{E} = (0, 0, \kappa\, z)$, dove κ è una costante.

(i) Scrivere il potenziale V di perturbazione corrispondente a tale campo esterno.

(ii) Dire in quanti sottolivelli si dividono i livelli di Bohr $n = 1$ e $n = 2$, calcolando l'effetto dovuto al campo elettrico al primo ordine mediante la κ teoria delle perturbazioni. Dire quali sono i numeri quantici che caratterizzano questi sottolivelli, e per ciascuna di essi, dare il grado di degenerazione (tenendo conto anche dello spin dell'elettrone).

N.B. Questo problema può essere risolto senza calcolare esplicitamente ΔE, ma utilizzando solamente considerazioni generali (teorema di Wigner-Eckart, simmetrie); tale calcolo è invece necessario per rispondede al punto (ii) del Problema 2.

Problema 2.

Consideriamo le linee di *assorbimento* associate a transizioni

$$[n = 1] \to [n = 2]$$

dell'atomo di idrogeno, quando l'atomo viene sottoposto ad un fascio di radiazione. Senza il campo elettrico (del problema 1) si osserverà una sola linea, corrispondente alla prima riga (α) della serie di Lyman, $\lambda = 1216 \times 10^{-8}$ cm.

(i) Discutere, utilizzando l'approssimazione di dipolo, come (in quante sottolinee) la suddetta linea di assorbimento si divide in presenza del campo elettrico del problema 1, assumendo una generica direzione del fascio e della polarizzazione.

(ii) Calcolare la variazione della lunghezza d'onda di ciascuna sottoriga del punto (i), e trovare (imponendo $\Delta\lambda \ll \lambda$) la condizione per κ tale che il risultato perturbativo al primo ordine sia valido.

(iii) La stessa domanda di (i), ma supponendo questa volta che il fascio di luce abbia la direzione di propagazione $\hat{\mathbf{k}} = (0, 0, 1)$, e sia polarizzata linearmente in direzione $\epsilon = (1, 0, 0)$.

Soluzione

Problema 1.

(i) Il potenziale è dato da

$$V = +\frac{\kappa}{2}\, e\, z^2, \tag{1}$$

($\mathbf{F} = -e\mathbf{E} = -\nabla V$). Esso ha la dimensione di un'energia, perciò la dimensione di κ è:

$$[\kappa\,] = gr \cdot \frac{cm^2}{sec^2} \cdot (gr \cdot \frac{cm^3}{sec^2})^{-1/2} \cdot cm^{-2} = gr^{1/2} \cdot cm^{-3/2} \cdot sec^{-1}. \tag{2}$$

(ii) In termini di operatori tensoriali sferici,

$$z^2 \sim T_0^0 - \sqrt{4/5}\, T_0^2. \tag{3}$$

Il teorema di Wigner-Eckart afferma allora che tutti gli elementi di matrici di z^2 non diagonali tra gli stati con $n = 2$,

$$|\,2,0,0\,\rangle, \quad |\,2,1,0\,\rangle, \quad |\,2,1,1\,\rangle, \quad |\,2,1,-1\,\rangle \tag{4}$$

si annullano. Si noti che l'elemento tra $|\,2,0,0\,\rangle$ e $|\,2,1,0\,\rangle$ è nullo sia per Wigner-Eckart (momento angolare) che per la parità.

Perciò basta considerare gli elementi diagonali.

$$\begin{aligned} &\langle\, 2,0,0\,|V|\,2,0,0\,\rangle = \\ =\ & \frac{\kappa\ e}{2} \cdot \frac{1}{8} \int_0^\infty dr\, r^2 \cdot r^2 \cdot (2-r)^2\, e^{-r}\, \frac{1}{4\pi} \int d\phi \int d(\cos\theta) \cdot \cos^2\theta \\ =\ & \frac{\kappa\, e}{2} \cdot \frac{1}{8} \cdot 14 \cdot 4! \cdot \frac{1}{4\pi} \cdot \frac{4\pi}{3} = 7\,\kappa\, e \cdot r_B^2, \end{aligned} \tag{5}$$

dove abbiamo ripristinato il raggio di Bohr. Analogamente,

$$\begin{aligned} &\langle\, 2,1,1\,|V|\,2,1,1\,\rangle = \langle\, 2,1,-1\,|V|\,2,1,-1\,\rangle = \\ =\ & \frac{\kappa\, e}{2} \cdot \frac{1}{24} \int_0^\infty dr\, r^2 \cdot r^2 \cdot r^2\, e^{-r}\, \frac{3}{8\pi} \int d\phi \int d(\cos\theta) \cdot \cos^2\theta \sin^2\theta \\ =\ & \frac{\kappa\, e}{2} \cdot \frac{1}{24} \cdot 6! \cdot \frac{3}{8\pi} \cdot \frac{8\pi}{15} = 3\,\kappa\, e \cdot r_B^2, \end{aligned} \tag{6}$$

$$\begin{aligned} &\langle\, 2,1,0\,|V|\,2,1,0\,\rangle = \\ =\ & \frac{\kappa\, e}{2} \cdot \frac{1}{24} \int_0^\infty dr\, r^2 \cdot r^2 \cdot r^2\, e^{-r}\, \frac{3}{4\pi} \int d\phi \int d(\cos\theta) \cdot \cos^2\theta \cos^2\theta \\ =\ & \frac{\kappa\, e}{2} \cdot \frac{1}{24} \cdot 6! \cdot \frac{3}{4\pi} \cdot \frac{4\pi}{5} = 9\,\kappa\, e \cdot r_B^2. \end{aligned} \tag{7}$$

Bisogna calcolare anche

$$
\begin{aligned}
&\langle\, 1,0,0\,|V|\, 1,0,0\,\rangle = \\
= \;& \frac{\kappa\, e}{2}\cdot 4\int_0^\infty dr\, r^2\cdot r^2\, e^{-2r}\,\frac{1}{4\pi}\int d\phi\int d(\cos\theta)\cdot\cos^2\theta \\
= \;& \frac{\kappa\, e}{2}\cdot 4\cdot\frac{4!}{2^5}\cdot\frac{1}{4\pi}\cdot\frac{4\pi}{3}=\frac{1}{2}\,\kappa\, e\cdot r_B^2. \qquad (8)
\end{aligned}
$$

In conclusione il livello $n = 2$ si divide in tre sottolivelli,

1. $|\, 2,1,\pm 1\,\rangle$ (doppia degenerazione)
2. $|\, 2,1,0\,\rangle$ (singola)
3. $|\, 2,0,0\,\rangle$ (singola)

Se il grado di spin è tenuto conto la degenerazione di ciascuno si raddoppia, per gli stati di spin $s_z = \pm\frac{1}{2}$.

Il livello $n = 1$ rimane singolo (doppia se si tiene conto dello spin).

Problema 2.

(i) Tenendo conto della regola di selezione di transizione di dipolo, tenendo conto anche della degenerazione dei livelli $|\, 2,1,1\,\rangle$ e $|\, 2,1,-1\,\rangle$, la linea di transizione

$$n = 1 \longrightarrow n = 2, \qquad (9)$$

si divide in due linee corrispondenti alle transizioni

$$|1,0,0\rangle \to |2,1,\pm 1\rangle \qquad (10)$$

e

$$|1,0,0\rangle \to |2,1,0\rangle. \qquad (11)$$

(ii) La lunghezza d'onda associata alla transizione è

$$\lambda = \frac{c\,h}{E_{2,\ell,m} - E_{1,0,0}}, \qquad (12)$$

$$E_{2,\ell,m} - E_{1,0,0} = \frac{3\,e^2}{8\,r_B} + \Delta E_{2,\ell,m} - \Delta E_{1,0,0}, \qquad (13)$$

con

$$\Delta E_{2,1,\pm 1} = 3\,\kappa\, e\cdot r_B^2; \qquad \Delta E_{2,1,0} = 9\,\kappa\, e\cdot r_B^2, \qquad \Delta E_{1,0,0} = \frac{1}{2}\,\kappa\, e\cdot r_B^2. \qquad (14)$$

Perciò

$$\lambda = \frac{c\,h}{\frac{3\,e^2}{8\,r_B} + \frac{5}{2}\,\kappa\,e\cdot r_B^2} \simeq \frac{16\pi\,r_B}{3\,\alpha}(1 - \frac{20\kappa r_B^3}{3e}) \tag{15}$$

$$\Delta\lambda \simeq -\frac{160\,\kappa\,c\,h\,r_B^4}{9\,e^3}, \tag{16}$$

per $|1,0,0\rangle \to |2,1,\pm1\rangle$;

$$\lambda = \frac{c\,h}{\frac{3\,e^2}{8\,r_B} + \frac{17}{2}\,\kappa\,e\cdot r_B^2} \simeq \frac{16\pi\,r_B}{3\,\alpha}(1 - \frac{68\kappa r_B^3}{3e}) \tag{17}$$

$$\Delta\lambda \simeq -\frac{544\,\kappa\,c\,h\,r_B^4}{9\,e^3}, \tag{18}$$

per $|1,0,0\rangle \to |2,1,0\rangle$. La condizione per la validità di questi risultati è:

$$\frac{68\kappa r_B^3}{3e} \ll 1, \qquad \kappa \ll \frac{3e}{68\,r_B^3}$$

(iii) In questo caso, l'elemento di matrice di transizione di dipolo è proporzionale a

$$\langle\psi_f|\epsilon\cdot\mathbf{r}|\psi_i\rangle = \frac{i}{2}\langle\psi_f|(T_1^1 - T_{-1}^1)|\psi_i\rangle, \tag{19}$$

per cui la transizione $|1,0,0\rangle \to |2,1,0\rangle$ è proibita. Si osserverà dunque una sola riga di assorbimento, per $|1,0,0\rangle \to |2,1,\pm1\rangle$.