# Compitino (IV) di Meccanica Quantistica

*3 giugno 2014 (A.A. 13/14)*

Tempo a disposizione: 2 ore

## Problema

La configurazione elettronica di un atomo consiste di un certo numero di elettroni in vari strati chiusi, e un guscio esterno $(n,d)$ parzialmente occupato da otto elettroni equivalenti.

**(i)** Costruire tutti i multipletti possibili $(L,S)$.

**(ii)** Determinare a quale multipletto appartiene lo stato fondamentale.

**(iii)** Determinare il termine spettrale (numeri quantici)

$$^{2S+1}L_J$$

dell'atomo nello stato fondamentale, tenendo conto delle prime correzionni relativistiche $\Delta E^{SO}$, assumendo l'accoppiamento di Russel-Saunders $(L-S)$.

**(iv)** Tra quali multipletti di cui al punto (i) è possibile una transizione di dipolo?

**(v)** Questo atomo , nello stato fondamentale, è sottoposto ad un campo magnetico esterno statico e uniforme, $\mathbf{B} = (0,0,B)$. In due regimi di (i) l'effetto Zeeman ($\Delta E^{(B)} \ll \Delta E^{SO}$) e di (ii) l'effetto Pachen-Back ($\Delta E^{SO} \ll \Delta E^{(B)} \ll \Delta E^{ee}$), stimare la correzione alla differenza tra lo stato fondamentale e del primo stato eccitato, $\Delta E_1^{(B)} - \Delta E_0^{(B)}$.

Formulario

$$\Delta H^{(B)} = \omega_L \hbar [L_z + 2S_z], \qquad \omega_L \equiv \frac{|e|B}{2mc} . \tag{1}$$

$$\Delta H^{(B)} = \omega_L \hbar g_L J_z , \qquad g_J = 1 + \frac{J(J+1) - L(L+1) + S(S+1)}{2J(J+1)} . \tag{2}$$

## Soluzione

**(i)** Conviene considerare le lacune invece degli elettroni. Avendo due lacune nello strato $d$ ($\ell = 2$), lo spin può essere o $S = 1$ o $S = 0$. Visto che lo stato $S = 1$ è simmetrico, l'orbitale deve essere antisimmetrico; con due orbitali con $\ell = 2$, possono formare $L = 3$ o $L = 1$.

Nel caso con $S = 0$, l'orbitale è simmetrico: $L = 4, 2, 0$.

I possibili multipletti sono:

$$(L,S) = (4,0), (2,0), (0,0), (3,1), (1,1).$$

I numeri totali degli stati sono

$$9 + 5 + 1 + 7 \cdot 3 + 3 \cdot 3 = 45,$$

che coincide con

$$\binom{10}{2} = 45.$$

**(ii)** Secondo la regola di Hunt, si ha $S$ massimo, $S = 1$, e tra loro, $L$ massimo, perciò,

$$(L,S) = (3,1).$$

**(iii)** $J = 4, 3, 2$. Visto che lo strato è occupato più della metà, il segno di $A$ è negativo, lo stato fondamentale ha $J$ massimo possibile, i.e., $J = 4$. Perciò lo stato fondamentale è

$$^3F_4$$

**(iv)** Tra nessuna coppia (diversa) dei multipletti del punto (i) è possibile una transizione a dipolo, poiché tutti gli stati dei vari multipletti hanno la stessa parità, $(+)^8 = +1$.

**(v)**

$$\Delta H^{(B)} = \omega_L \hbar [L_z + 2S_z], \qquad \omega_L \equiv \frac{|e|B}{2mc} \,. \tag{3}$$

$$\Delta H^{(B)} = \omega_L \hbar \, g_L J_z \,, \qquad g_J = 1 + \frac{J(J+1) - L(L+1) + S(S+1)}{2J(J+1)} \,. \tag{4}$$

Per $J = 4$, $L = 3$, $S = 1$,

$$g_L = 1 + \frac{20 - 12 + 2}{40} = \frac{5}{4}. \tag{5}$$

Nell'approssimazione di Zeeman, $\Delta E^{(B)} \ll \Delta E^{SO}$, l'effetto del canpo magnetico è piccolo rispetto alla struttura fine. Al primo ordine in $B$ la differenza dell'energia $\Delta E_1^{(B)} - \Delta E_0^{(B)}$ è:

$$E_1^{(B)} - E_0^{(B)} \simeq \frac{5}{4} \omega_L \hbar \,. \tag{6}$$

Nel regime di Paschen-Back, trascurando l'effetto spin-orbita, si ha (utilizzando la (3),

$$E_1^{(B)} - E_0^{(B)} \simeq \omega_L \hbar \,. \tag{7}$$