Compitino di Meccanica Quantistica

14 aprile 2014 (A.A. 13/14)

Tempo a disposizione: 2 ore

Problema

Un atomo di idrogeno nello stato fondamentale è sottosposto ad una radiazione elettromagnetica a partire da $t = 0$; si chiede di studiare il processo di ionizzazione (l'effetto fotoelettrico) in teoria delle perturbazioni. L'Hamiltoniana è

$$H = \frac{(\hat{\mathbf{p}} + \frac{e}{c}\mathbf{A})^2}{2m} - \frac{e^2}{r} \,. \tag{1}$$

(i) Al primo ordine in $\mathbf{A}$ e nella gauge $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$, si scriva la precedente Hamiltoniana come somma della Hamiltoniana dell'atomo di idrogeno e del potenziale di perturbazione, V. Qual'è la forma di V?

(ii) Supponiamo che il campo di radiazione sia dato da,

$$\mathbf{A} = A_0\, \varepsilon\, e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - i\omega t} + c.c. \,, \qquad \omega = kc, \tag{2}$$

dove A_0 può essere espresso in termini dell'intensità di luce I,

$$A_0^2 = \frac{2\pi c}{\omega^2} I = \frac{2\pi c}{\omega^2} N\omega\hbar \,, \tag{3}$$

e ε è il vettore di polarizzazione. Si verifichi che la (2) soddisfi la condizione di gauge $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$, e si scriva l'operatore di perturbazione $\hat{F}$, dove

$$V = \hat{F}\, e^{-i\omega t} + h.c. \,, \tag{4}$$

in termini di A_0, m, e, ε. Si dica quali tensori sferici sono contenuti nell'operatore $\hat{F}$.

(iii) Sotto certe condizioni il fattore $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ nel potenziale di perturbazione può essere approssimato da

$$e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \simeq 1 \,. \tag{5}$$

Assumendo la (5) - si dica per quali ω essa è valida - si determini la distribuzione angolare dell'elettrone finale senza fare il calcolo della probabilità di transizioni, basandosi esclusivamente su un argomento generale di simmetrie. Si assuma che il fotone incidente viaggi nella direzione di $\hat{z}$ e sia polarizzato linearmente in direzione $\hat{x}$. Si descriva come cambierebbe la risposta se la (5) non fosse più valida ma se la deviazione da 1 fosse piccola.

(iv) Assumendo che la condizione Eq. (5) sia soddisfatta (e con le proprietà di luce menzionate), si calcoli la probabilità di ionizzazione per intervallo unitario del tempo. Si assumano le funzioni d'onda iniziale e finale dell'elettrone

$$\psi_i = \frac{2r_B^{-3/2}}{\sqrt{4\pi}} e^{-r/r_B} \,; \qquad \psi_f = e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar}. \tag{6}$$

Formulario:

La densità di stati:

$$d\Phi = \frac{d^3\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} = \frac{mp\, dE\, d\Omega}{(2\pi\hbar)^3} \tag{7}$$

Formula di Fermi:

$$dw_{fi} = \frac{2\pi}{\hbar} |\hat{F}_{fi}|^2 \delta(E_f - E_i - \omega\hbar)\, d\Phi \tag{8}$$

Soluzione (il punto (iii) migliorato da alcuni di voi)

(i)

$$V = \frac{e}{2mc}(\mathbf{A}\cdot\hat{\mathbf{p}} + \hat{\mathbf{p}}\cdot\mathbf{A}) = \frac{e}{mc}\mathbf{A}\cdot\hat{\mathbf{p}}\,, \tag{9}$$

N.B.

$$\hat{\mathbf{p}}\cdot\mathbf{A} = -i\hbar(\nabla\cdot\mathbf{A}) + \mathbf{A}\cdot\hat{\mathbf{p}} = \mathbf{A}\cdot\hat{\mathbf{p}}\,. \tag{10}$$

utilizzando la condizione,

$$\nabla\cdot\mathbf{A} = 0\,. \tag{11}$$

(ii)

$$\nabla\cdot\mathbf{A} \propto \mathbf{k}\cdot\varepsilon\,, \tag{12}$$

che è nullo poiché il vettore di polarizzazione è perpendicolare alla direzione della propagazione.

$$\hat{F} = \frac{eA_0}{mc}e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\varepsilon\cdot\hat{\mathbf{p}}\,. \tag{13}$$

Sviluppando $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ e scegliendo $\mathbf{k} = (0,0,k)$, $\varepsilon = (1,0,0)$ (per es.), si trovano gli operatori,

$$p_x,\, p_x z,\, p_x z^2,\, \ldots, p_x z^n, \ldots. \tag{14}$$

si vede che i tensori sferici contenuti in $\hat{F}$ sono di rango, $1,2,3,4,\ldots$, ma non c'è nessun componente di rango 0 (scalare).

N.B. ε e $\mathbf{k}$, anche se sono vettori, sono semplicemente numeri e vanno considerati tali, come operatori.

(iii) La (5) è valida se $|\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}| \ll 1$. Visto che nel calcolo della probabilità di transizione $|\mathbf{r}|$ è limitato dal raggio di Bohr, r_B, la condizione è che

$$k = \frac{\omega}{c} \ll \frac{1}{r_B}, \qquad \omega \ll \frac{c}{r_B}, \qquad \lambda = \frac{2\pi}{k} \gg 2\pi r_B. \tag{15}$$

D'altronde per ionizzare l'atomo si richiede un'energia sufficientemente grande,

$$E = \omega\hbar > |\frac{e^2}{2r_B}|, \tag{16}$$

Si vede che l'energia minima del fotone necessaria per la ionizzazione è compatibile con la condizione (15), ma per radiazione con la frequenza troppo alta l'approssimazione $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \simeq 1$ non sarà più valida.

Assumendo la (15), l'operatore $\hat{F}$ è:

$$\hat{F} = \frac{eA_0}{mc}\hat{p}_x = T^1_1 - T^1_{-1}\,. \tag{17}$$

dove abbiamo introdotto un tensore sferico di rango 1 per $\hat{F}$. La probabiltà di transizione è data dalla formula di Fermi,

$$w = \frac{2\pi}{\hbar}|\hat{F}_{fi}|^2\delta(E_f - E_i - \omega\hbar)\,d\Phi\,, \qquad \hat{F}_{fi} = \langle f|\hat{F}|i\rangle\,. \tag{18}$$

Visto che lo stato iniziale è uno stato S ($\ell = m = 0$), segue dal teorema di Wigner-Eckart applicato all'elemento di matrice $\langle f|\hat{F}|i\rangle$ che lo stato finale è nello stato $\psi_f \propto Y_{1,1} - Y_{1,-1}$. La distribuzione angolare dell'elettrone finale è quindi

$$dP = \text{cost.}\,|Y_{1,1} - Y_{1,-1}|^2 d\Omega = \frac{3}{4\pi}\,d\Omega\,\sin^2\theta\cos^2\phi\,. \tag{19}$$

N.B. Per vedere questo risultato più chiaramente,

$$\langle \mathbf{p}|\hat{F}|100\rangle \propto \int d^3r\, e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar}\, \hat{p}_x\, e^{-r/r_B} \tag{20}$$

dove

$$e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar} = e^{ikr\cos\theta} = \sum_{\ell=0}^{\infty}(2\ell+1)i^\ell j_\ell(kr)P_\ell(\cos\theta). \tag{21}$$

dove θ è l'angolo tra la direzione di $\mathbf{p}$ e quella di $\mathbf{r}$. Usiamo ora

$$e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = 4\pi\sum_{\ell=0}^{\infty} i^\ell j_\ell(kr) \sum_{m=-\ell}^{\ell} Y_{\ell m}(\Omega_{\hat{\mathbf{r}}})Y^*_{\ell m}(\Omega_{\hat{\mathbf{p}}})\,, \tag{22}$$

dove $\Omega_{\hat{\mathbf{p}}}$ e $\Omega_{\hat{\mathbf{r}}}$ indicano le variabili angolari associate a $\mathbf{k} = \mathbf{p}/\hbar$ and $\mathbf{r}$. Ora l'integrale angolare in (20) dà

$$\int d\Omega_{\hat{\mathbf{r}}}\, Y^*_{\ell m}(\Omega_{\hat{\mathbf{r}}})\; \hat{p}_x\, e^{-r/r_B} = c\,(\delta_{\ell,1}\delta_{m,1} - \delta_{\ell,1}\delta_{m,-1}) \tag{23}$$

dove abbiamo fatto uso del teorema di Wigner-Eckart. Segue che la distribuzione finale dell'elettrone è data da

$$dP = \frac{3}{4\pi}\, d\Omega_{\hat{\mathbf{p}}}\, \sin^2\theta_{\hat{\mathbf{p}}} \cos^2\phi_{\hat{\mathbf{p}}} \propto |Y_{1,1}(\Omega_{\hat{\mathbf{p}}}) - Y_{1,-1}(\Omega_{\hat{\mathbf{p}}})|^2\, \Omega_{\hat{\mathbf{p}}} \propto p_x^2\, d\Omega_{\hat{\mathbf{p}}} \tag{24}$$

come annunciato prima, (19).

Tenendo conto di un piccolo termine in

$$\hat{F} = \frac{eA_0}{mc} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\, \varepsilon\cdot\mathbf{p} \sim \frac{eA_0}{mc}(p_x + ip_x kz + \ldots) \tag{25}$$

lo stato finale avrà una piccola componente $\propto (Y_{1,1} - Y_{1,-1})Y_{1,0}$,

$$\psi_{finale} = c_0(Y_{1,1} - Y_{1,-1}) + c_1(Y_{1,1} - Y_{1,-1})Y_{1,0}\ . \tag{26}$$

La distribuzione angolare avrà dunque un piccolo termine di interferenza,

$$\begin{aligned} dP &= |c_0|^2|Y_{1,1} - Y_{1,-1}|^2 + 2\Re(c_0c_1^*)\,(Y_{1,1} - Y_{1,-1})^2 Y_{1,0} \\ &\propto \sin^2\theta\cos^2\phi\,(A + B\cos\theta)\, d\Omega \end{aligned} \tag{27}$$

con

$$\left|\frac{B}{A}\right| = O(kr_B)\ . \tag{28}$$

Cioè una piccola parte $\propto \sin^2\theta\,\cos\theta\,\cos^2\phi$ sovrapposta alla distribuzione dominante, $\propto \sin^2\theta\,\cos^2\phi$.

(iv)

$$\begin{aligned} \hat{F}_{fi} &= \langle f|\hat{F}|i\rangle = \frac{eA_0}{mc}\frac{2r_B^{-3/2}}{\sqrt{4\pi}} \int d^3r\, e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar}\, \hat{p}_x\, e^{-r/r_B} \\ &= \frac{eA_0}{mc}\frac{2r_B^{-3/2}}{\sqrt{4\pi}}\, p_x \int d^3r\, e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar}\, e^{-r/r_B} \end{aligned} \tag{29}$$

L'integrale è facile da calcolare: ($\mathbf{k} = \mathbf{p}/\hbar$, $r_B \to 1$):

$$\begin{aligned} &\int d^3r\, e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar}\, e^{-r/r_B} = \int d^3r\, e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\, e^{-r} = \frac{2\pi}{-ik}\int_0^\infty dr r(e^{-ikr} - e^{ikr})e^{-r} \\ &= \frac{8\pi}{(1+k^2)^2} = r_B^3\frac{8\pi}{(1+k^2r_B^2)^2} \end{aligned} \tag{30}$$

dove nell'ultimo membro abbiamo ripristinato r_B.

Perciò

$$\hat{F}_{fi} = 4\sqrt{4\pi}\, r_B^{3/2}\, \frac{eA_0}{mc}\, \frac{p_x}{(1+p^2 r_B^2/\hbar^2)^2}\Big|_{p=\sqrt{2m(\omega\hbar - e^2/2r_B)}} \ . \tag{31}$$

$$dw_{fi} = \frac{2\pi}{\hbar} |\hat{F}_{fi}|^2\, \frac{mp\, d\Omega}{(2\pi\hbar)^3} = C\, \frac{p\, p_x^2}{(1+p^2 r_B^2/\hbar^2)^4}\, d\Omega \ , \tag{32}$$

dove la costante C è data da

$$C = |4\sqrt{4\pi}\, r_B^{3/2}\, \frac{eA_0}{mc}|^2\, \frac{2\pi}{\hbar}\, \frac{m}{(2\pi\hbar)^3} \tag{33}$$

L'unico integrale non banale da fare è

$$\int d\cos\theta\, d\phi\, \sin^2\theta\, \cos^2\phi = \frac{4\pi}{3} \ . \tag{34}$$

Si noti che la distribuzione angolare dell'elettrone finale nella (32) è effettivamente in accordo con quanto ci si aspetta dal teorema di Wigner-Eckart (19).