Meccanica Quantistica: Compitino IV

30 maggio 2016 (A.A. 15/16)

Tempo a disposizione: 2 ore

Problema

Un atomo sconosciuto è descritto da una configurazione elettronica composta da un certo numero di strati chiusi e un guscio esterno (n, d) parzialmente occupato da sette elettroni equivalenti.

(i) Dire quanti stati totalmente antisimmetrici (i determinanti di Slater) si possono formare con gli elettroni del guscio esterno.

(ii) Determinare, applicando la regola di Hund, il multipletto (L, S) al quale appartiene lo stato fondamentale dell'atomo.

(iii) Determinare il termine spettrale

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

dell'atomo nello stato fondamentale, assumendo che le interazioni spin-orbita siano quelle dominanti tra le correzioni relativistiche e assumendo il regime di Russel-Saunders ($H_{ee} \gg H_{LS}$).

(iv) Questo atomo, nello stato fondamentale, viene sottoposto ad un campo magnetico esterno statico e uniforme, $\mathbf{B} = (0, 0, B)$. Nel caso in cui il campo magnetico sia debole, stimare la correzione all'energia dello stato fondamentale dovuta al campo magnetico, incluso il segno. Stimare la differenza dell'energia dello stato fondamentale e quella del primo stato eccitato. Potete usare le formule, (1), (2).

(v) Nel caso di un campo magnetico forte (cosiddetto l'effetto Paschen-Back) si può trascurare la struttura fine rispetto alla correzione dovuta al campo magnetico esterno, (1). Assumendo che l'effetto del campo magnetico esterno (1) sia comunque molto piccolo rispetto alle differenze dell'energie tra i multipletti diversi, (a) stimare la correzione all'energia dello stato fondamentale dovuta al campo magnetico, incluso il segno. e (b) stimare la differenza dell'energia dello stato fondamentale dell'atomo e quello del primo stato eccitato.

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

Problema 1

(i) Il numero di possibili stati di singolo elettrone nel guscio di tipo d ($\ell = 2$) è $2(2\ell + 1) = 10$. Il numero di determinanti di Slater che si possono formare con sette elettroni equivalenti è

$$\binom{10}{7} = \binom{10}{3} = \frac{10 \cdot 9 \cdot 8}{3!} = 120\,. \tag{3}$$

(ii) Conviene considerare le lacune invece degli elettroni. Avendo tre lacune nello strato d ($\ell = 2$), lo spin può essere o $S = \frac{3}{2}$ o $S = \frac{1}{2}$. Lo stato fondamentale corrisponde (Hund) ad uno stato di spin totale massimo, i.e., $S = \frac{3}{2}$, che è totalmente simmetrico. Segue che la funzione d'onda orbitale deve essere totalmente antisimmetrico. Inoltre, secondo la regola di Hund, tra i multipletti con S massimo, se non è univoco, bisogna scegliere il multipletto con L massimo.

Avendo tre elettroni con $\ell = 2$, si possono formare vari valori di momento angolare totale, $L = 0, 1, 2, \ldots, 6$. Per costruire la funzione d'onda orbitale totalmente antisimmetrica, tre elettroni (lacune) devono occupare gli stati di ℓ_z diversi. Il modo di massimizzare il valore di L_z (quindi L) è quello di prendere tre stati

$$\psi_{2,2}(\mathbf{r}_1)\psi_{2,1}(\mathbf{r}_2)\psi_{2,0}(\mathbf{r}_3) - \ldots \tag{4}$$

dove $\ldots$ rappresenta altri termini per antisimmetrizzazione. In questo caso, $L_z = 3$, perciò $L = 3$. Dunque, il multipletto al quale appartiene lo stato fondamentale è

$$(L, S) = (3, \tfrac{3}{2}).$$

(iii) È un atomo "invertito"; lo stato fondamentale è

$$^4F_{9/2}\,. \tag{5}$$

(iv) Il fattore di Landé è in questo caso

$$g_L = 1 + \frac{\frac{9}{2}\frac{11}{2} - 3 \cdot 4 + \frac{3}{2}\frac{5}{2}}{2\,\frac{9}{2}\frac{11}{2}} = \frac{4}{3}\,. \tag{6}$$

L'energia dello stato fondamentale è modificato per

$$\omega_L \hbar\, g_L(-\frac{9}{2}) = -6\,\omega_L\,\hbar\,. \tag{7}$$

La differenza dell'energia tra lo stato fondamentale e il primo stato eccitato è dato da

$$\omega_L \hbar g_L \Delta J_z = \frac{4}{3}\,\omega_L\,\hbar\,. \tag{8}$$

(v) L'energia dello stato fondamentale è perturbato per

$$\omega_L \hbar(-3 - 3) = -6\,\omega_L\,\hbar\,. \tag{9}$$

La differenza dell'energia tra lo stato fondamentale e il primo stato eccitato è dato da

$$\omega_L \hbar \Delta L_z = \omega_L \hbar 2 \Delta S_z = \omega_L\,\hbar\,. \tag{10}$$