

Meccanica Quantistica

Compitino IV

6 giugno 2017 (A.A. 16/17)

Tempo a disposizione: 2 ore

Problemi

L'atomo di Cromo (Cr), il numero atomico 24, ha la configurazione elettronica

$$[Ar] 4s 3d^5 \quad (1)$$

nello stato fondamentale, dove $[Ar]$ rappresenta la configurazione elettronica di ${}^{18}Ar$.

- (i) Si considerino prima solo gli elettroni equivalenti dello strato $3d$. Quanti stati totalmente antisimmetrici (determinanti di Slater) si possono formare?
- (ii) Trovare il multipletto (L, S) formato dai cinque elettroni del guscio $3d$, nello stato fondamentale dell'atomo, applicando la regola di Hund. Trovare $J^{(3d)}$ totale.
- (iii) Si consideri l'intero atomo ora. Determinare il termine spettroscopico, assumendo sempre che la regola di Hund sia valida.
- (iv) Qual' è la spiegazione fisica della regola di Hund in generale?
- (v) L'atomo è sottoposto al campo magnetico esterno uniforme e costante, $\mathbf{B} = (0, 0, B)$. Determinare in quanti sottolivelli si divide lo stato fondamentale, e determinare lo spostamento dell'energia dello stato fondamentale.

Si consideri ora uno stato eccitato di Cromo,

$$[Ar] 4p 3d^5. \quad (2)$$

- (vi) Supponendo che il risultato del punto (ii) valga sempre, e seguendo la procedura (iii), si determini il multipletto cui appartiene questo stato.
- (vii) Trascurando la struttura fine, discutere in quanti sottolivelli si divide questo stato eccitato, in presenza del campo magnetico, \mathbf{B} .

Se occorre, potete usare le formule:

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

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

Soluzione

(i)

$$\binom{10}{5} = \frac{10 \cdot 9 \cdot 8 \cdot 7 \cdot 6}{5!} = 252. \quad (5)$$

- (ii) Secondo la regola di Hund, $S = \frac{5}{2}$, totalmente simmetrico rispetto a spin. L'orbitale deve essere in uno stato totalmente antisimmetrico. È necessario utilizzare tutti gli stati di $\ell = 2$,

$$\Psi_{2,2}, \Psi_{2,1}, \Psi_{2,0}, \Psi_{2,-1}, \Psi_{2,-2}. \quad (6)$$

Segue che tale stato ha $L = 0$. Il multipletto formato dagli elettroni del guscio $3d$ è $(0, \frac{5}{2}) = {}^6S$.

$$J^{(3d)} = \frac{5}{2}. \quad (7)$$

- (iii) Combinando $(0, \frac{5}{2})$ e $(0, \frac{1}{2})$, si ha $(0, 3)$. L'atomo è nello stato

$${}^7S_3. \quad (8)$$

- (iv) Più grande è il valore di S , è più simmetrica la funzione d'onda di spin; di conseguenza, la funzione d'onda orbitale è più antisimmetrica rispetto allo scambi di elettroni, con meno probabilità di trovare due elettroni nello stesso punto spaziale o comunque, vicini. Segue che l'effetto di ripulsione elettrostatica, che inalza l'energia, è meno importante. L'effetto di ripulsione elettrostatica è altresì meno importante per gli stati di L più alti, per dato S , rispetto a stati con L più piccoli, per via dell'effetto delle forze centrifughe.

- (v) In 7 sottolivelli, secondo S_z . Lo spostamento dell'energia dello stato fondamentale è $2\omega_L \hbar S_z = -6\omega_L \hbar$.

Si consideri ora uno stato eccitato di Cromo,

$$[Ar] 4p 3d^5. \quad (9)$$

- (vi) Combinando $(1, \frac{1}{2})$ dell'elettrone in $4p$ e $(0, \frac{5}{2})$ degli elettroni nello strato $3d$, si ha $(L, S) = (1, 3)$.

- (vii) Trascurando la struttura fine, le correzioni sono date direttamente dalla formula

$$\Delta H^{(B)} = \omega_L \hbar [L_z + 2S_z]. \quad (10)$$

I valori di $\Delta E / \omega_L \hbar$ per gli stati nel multipletto $(L, S) = (1, 3)$ sono

$$7, 5, 3, 1, -1, -3, -5, \quad L_z = +1; \quad (11)$$

$$6, 4, 2, 0, -2, -4, -6, \quad L_z = 0; \quad (12)$$

$$5, 3, 1, -1, -3, -5, -7, \quad L_z = -1. \quad (13)$$

Dunque questo livello si divide in $7 + 6 + 2 = 15$ sottolivelli.