

Microfisica Quantistica - A.A. 2013/14

Prova di esonero, 10 Aprile 2014

Soluzioni

• Esercizio 1:

Un gas è costituito da ioni Li^{++} . L'elettrone superstite è eccitato ad un particolare livello energetico caratterizzato dal numero quantico principale n , e da un certo numero quantico j . In emissione verso stati con $n' < n$ si osservano soltanto due righe, separate in energia di una quantità pari a $R\alpha^2/2$, dove R è l'energia di Rydberg e α è la costante di struttura fine.

1. Determinare il numero quantico n' e i due valori del numero quantico j' degli stati finali.
2. In base al numero delle righe osservate dedurre, se possibile, i numeri quantici n e j dello stato iniziale, specificando espressamente se uno o entrambi non possono essere determinati in base ai dati a disposizione.

Soluzione:

la separazione è dovuta alla struttura fine del livello di arrivo. In approssimazione di dipolo deve essere $\Delta j = j' - j = 0, \pm 1$ e quindi i livelli di arrivo sono contigui con una separazione in j' di una unità. La struttura fine dell'atomo idrogenoide è:

$$E_{n,j} = E_n \left[1 + \frac{(Z\alpha)^2}{n^2} \left(\frac{n}{j+1/2} - \frac{3}{4} \right) \right] \quad E_n = \frac{E_1}{n^2} = -\frac{Z^2}{n^2} R \quad (1)$$

Se chiamo j'_M il più grande dei valori del numero quantico j' degli stati di arrivo, avrò che gli stati finali sono n', j'_M e $n', j'_M - 1$. Quindi la separazione osservata corrisponde a

$$\delta E'_n = E_1 \frac{(Z\alpha)^2}{n'^4} \left(\frac{n'}{j'_M - 1/2} - \frac{n'}{j'_M + 1/2} \right) = \frac{Z^4 \alpha^2}{n'^3} R \left(\frac{1}{j'_M - 1/2} - \frac{1}{j'_M + 1/2} \right) = \frac{Z^4 \alpha^2}{n'^3} R \frac{1}{j'^2_M - 1/4} \quad (2)$$

Uguagliando questo risultato al dato del problema si ottiene:

$$\frac{R\alpha^2}{2} = \frac{Z^4 \alpha^2}{n'^3} R \frac{1}{j'^2_M - 1/4} \quad (3)$$

che per $Z = 3$ fornisce

$$2 \cdot 3^4 = n'^3 (j'^2_M - 1/4) \quad (4)$$

Ma $j'_M = l' \pm 1/2$ con l' intero quindi anche j'_M è un intero. Poichè anche n' deve essere intero la sola possibilità di soddisfare la relazione (4) è:

$$n' = 3 \quad j'_M = 5/2 \quad (5)$$

Il valore di j del livello iniziale deve essere tale da poter fornire i due valori osservati di $j' = 5/2, 3/2$ in approssimazione di dipolo. Sono quindi possibili solo i valori $j = 3/2$ e $j = 5/2$. Tuttavia per $j = 3/2$ dovrei avere una terza riga verso lo stato finale con $j' = 1/2$ che invece non si osserva. Concludiamo quindi che $j = 5/2$. Nulla si può invece dire sul valore di n dello stato iniziale perchè il numero quantico $j = 5/2$ è compatibile con tutti i valori di $n > 3$.

• **Esercizio 2:**

Un'ampolla contenete idrogeno atomico a $T=300K$ viene irradiato con una radiazione avente uno spettro continuo compreso tra 50000 cm^{-1} e 102000 cm^{-1} .

- (a) indicare le righe di assorbimento principali osservabili in questo intervallo per transizioni di dipolo elettrico.
- (b) quale potere risolutivo è necessario per risolvere la struttura fine di queste righe?

Soluzione:

I livelli energetici per l'idrogeno sono:

$$E_n = \frac{E_1}{n^2} = -\frac{R(H)}{n^2} \quad R(H) = \frac{M_p}{m_e + M_p} R(\infty) = 109677\text{ cm}^{-1} \quad (6)$$

La popolazione dei livelli eccitati rispetto allo stato fondamentale all'equilibrio termico è regolata dalla distribuzione di Boltzmann

$$\frac{N_n}{N_1} = e^{-\frac{E_n - E_1}{k_B T}} \quad (7)$$

Per il primo livello eccitato si ha

$$\frac{N_2}{N_1} = e^{-\frac{E_2 - E_1}{k_B T}} = e^{-\frac{3R}{4k_B T}} = e^{-\frac{3 \times 13.6 \times 1.16 \times 10^4}{4 \times 300}} = e^{-394.4} \simeq 0 \quad (8)$$

Concludiamo quindi che gli atomi del gas sono nel loro stato fondamentale $1s$. Per le regole di selezione di dipolo posso avere solo stati finali di tipo np . Le energie di queste righe principali saranno

$$\Delta E_n = E_n - E_1 = R \left(1 - \frac{1}{n^2} \right) = 109677 \frac{n^2 - 1}{n^2} \text{ cm}^{-1} \quad (9)$$

Nello specifico le prime righe sono

$$\begin{aligned} \Delta E_2 &= 109677 \frac{3}{4} = 82257.8 \text{ cm}^{-1} \\ \Delta E_3 &= 109677 \frac{8}{9} = 97490.7 \text{ cm}^{-1} \\ \Delta E_4 &= 109677 \frac{15}{16} = 102822.2 \text{ cm}^{-1} \end{aligned} \quad (10)$$

Poichè la radiazione incidente è tra 50000 e 102000 cm^{-1} , posso solo eccitare le prime due transizioni.

Con le correzioni relativistiche, i livelli finali con $l = 1$ (posso solo andare lì partendo da $1s$) si splittano in due livelli corrispondenti a $j = 1/2, 3/2$ che hanno energie secondo la relazione

$$E_{n,j} = E_n \left[1 + \frac{(Z\alpha)^2}{n^2} \left(\frac{n}{j + 1/2} - \frac{3}{4} \right) \right] \quad (11)$$

La separazione delle due righe per il generico livello n è (per l'idrogeno con $Z = 1$)

$$\delta E_n = |E_{n,1/2} - E_{n,3/2}| = \frac{\alpha^2}{n^3} \left(1 - \frac{1}{2} \right) R = \frac{\alpha^2 R}{2n^3} \quad (12)$$

Per le due righe da considerare si ha

$$\delta E_2 = \frac{109677}{2^4 \times 137^2} \text{ cm}^{-1} = 0.3654 \text{ cm}^{-1} \quad \delta E_3 = \frac{109677}{2 \times 3^3 \times 137^2} \text{ cm}^{-1} = 0.108 \text{ cm}^{-1} \quad (13)$$

Il poter risolutivo necessario per poter risolvere la struttura fine di entrambe le righe è

$$P = \frac{E_{max}}{\delta E_{max}} = \frac{E_3}{\delta E_3} = \frac{97490.7}{0.108} \sim 10^6 \quad (14)$$

• **Esercizio 3:**

Si vuole descrivere lo stato fondamentale di un oscillatore anarmonico di hamiltoniana

$$\hat{H} = -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} \omega^2 x^2 + \frac{1}{2} \lambda x^3 \quad (15)$$

con una funzione di prova del tipo

$$\Psi_T(x) = \phi_0(x) + \alpha \phi_1(x) \quad (16)$$

dove $\phi_i(x)$ sono le autofunzioni dell'oscillatore armonico di stessa pulsazione e α è un parametro reale. Utilizzando il principio variazionale, ottenere la funzione di prova che meglio approssima lo stato fondamentale dell'oscillatore anarmonico e calcolarne l'energia in funzione di λ . Limitare l'analisi al regime dei piccoli valori di λ specificandone il significato fisico. Confrontare il risultato con quello che si otterrebbe con la teoria delle perturbazioni al prim'ordine.

Soluzione:

$$\begin{aligned} E_T &= \frac{\langle \phi_0 + \alpha \phi_1 | H | \phi_0 + \alpha \phi_1 \rangle}{\langle \phi_0 + \alpha \phi_1 | \phi_0 + \alpha \phi_1 \rangle} = \frac{\langle \phi_0 | H | \phi_0 \rangle + 2\alpha \langle \phi_1 | H | \phi_0 \rangle + \alpha^2 \langle \phi_1 | H | \phi_1 \rangle}{1 + \alpha^2} \\ &= \frac{E_0 + \alpha^2 E_1 + \lambda/2 \langle \phi_0 | x^3 | \phi_0 \rangle + 2\alpha \lambda/2 \langle \phi_1 | x^3 | \phi_0 \rangle + \alpha^2 \lambda/2 \langle \phi_1 | x^3 | \phi_1 \rangle}{1 + \alpha^2} \end{aligned} \quad (17)$$

Si ha per motivi di simmetria (integrando dispari su intervallo simmetrico) che

$$\langle \phi_0 | x^3 | \phi_0 \rangle = \langle \phi_1 | x^3 | \phi_1 \rangle = 0 \quad (18)$$

Invece per l'altro integrale si ha

$$\langle \phi_0 | x^3 | \phi_1 \rangle = \mathcal{I} = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/2} \left(\frac{2m\omega}{\hbar} \right)^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} dx x^4 e^{-\frac{m\omega}{\hbar} x^2} = \frac{3}{2\sqrt{2}} \left(\frac{\hbar}{m\omega} \right)^{3/2} \quad (19)$$

e sostituendo in equazione (17), usando anche la relazione per gli autovalori dell'oscillatore armonico: $E_n = \hbar\omega(n + 1/2)$, si ottiene

$$E_T(\alpha) = \frac{\hbar\omega}{2} \left(\frac{1 + 3\alpha^2 + \alpha\lambda\mathcal{I}}{1 + \alpha^2} \right) \quad (20)$$

avendo definito

$$\mathcal{I} = \frac{3}{2\sqrt{2}} \left(\frac{\hbar}{m\omega} \right)^{3/2} \frac{2}{\hbar\omega} \quad (21)$$

Il valore ottimale di α si ottiene imponendo a zero la derivata prima

$$\frac{\partial E_T}{\partial \alpha} = \frac{\hbar\omega}{2} \left(\frac{-\alpha^2 \lambda \mathcal{I} + 4\alpha + \lambda \mathcal{I}}{(1 + \alpha^2)^2} \right) = 0 \quad (22)$$

che è anche soluzione di

$$\alpha^2 - \frac{4}{\lambda \mathcal{I}} \alpha - 1 = 0 \quad \alpha_{\pm} = \frac{2}{\lambda \mathcal{I}} \left(1 \pm \sqrt{1 + \frac{\lambda^2 \mathcal{I}^2}{4}} \right) \quad (23)$$

Per $\lambda^2 \mathcal{I}^2 / 4 \ll 1$ possiamo sviluppare in serie la radice ottenendo

$$\alpha_{\pm} \simeq \frac{2}{\lambda \mathcal{I}} \left[1 \pm \left(1 + \frac{\lambda^2 \mathcal{I}^2}{8} \right) \right] \quad (24)$$

ossia

$$\begin{aligned} \alpha_+ &\simeq \frac{4}{\lambda \mathcal{I}} + \frac{\lambda \mathcal{I}}{4} \\ \alpha_- &\simeq -\frac{\lambda \mathcal{I}}{4} \end{aligned}$$

Sostituendo queste espressioni nell'equazione (20) e sviluppando in $\lambda\mathcal{I}$ intorno all'origine, si ottiene

$$\begin{aligned} E(\alpha_+)/\hbar\omega &= \frac{768 + 176(\lambda\mathcal{I})^2 + 7(\lambda\mathcal{I})^4}{256 + 48(\lambda\mathcal{I})^2 + (\lambda\mathcal{I})^4} \simeq 3 + \frac{(\lambda\mathcal{I})^2}{8} - \frac{(\lambda\mathcal{I})^4}{128} \\ E(\alpha_-)/\hbar\omega &= \frac{16 - (\lambda\mathcal{I})^2}{16 + (\lambda\mathcal{I})^2} \simeq 1 - \frac{(\lambda\mathcal{I})^2}{8} + \frac{(\lambda\mathcal{I})^4}{128} < E(\alpha_+)/\hbar\omega \end{aligned} \quad (25)$$

Questa relazione mostra che la radice corrispondente al minimo è α_- e il valore variazionale dell'energia dell'oscillatore anarmonico risulta:

$$E_o = E_T(\alpha_-) = \hbar\omega \frac{16 - (\lambda\mathcal{I})^2}{16 + (\lambda\mathcal{I})^2} \simeq \hbar\omega \left(1 - \frac{(\lambda\mathcal{I})^2}{8} \right) \quad (26)$$

Si vede che per piccoli valori di λ , il termine anarmonico diminuisce l'energia dell'oscillatore. Invece in teoria delle perturbazioni, la correzione al prim'ordine all'energia dello stato fondamentale è nulla per motivi di simmetria come notato precedentemente.

Relazioni utili:

$$1\text{eV} = 8065.48 \text{ cm}^{-1} = 1.16045 \cdot 10^4 \text{ K}$$

$$\text{Costante di Rydberg: } R(\infty) = 13.6\text{eV} = 109737 \text{ cm}^{-1}$$

$$\text{Massa del protone: } M_p = 1836.15 m_e$$

$$\text{costante di struttura fine: } \alpha = 1/137$$

$$\begin{aligned} \phi_0(x) &= \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right) & \phi_1(x) &= \left(\frac{2m\omega}{\hbar} \right)^{1/2} x \phi_0(x) \\ \int_0^\infty dx \quad x^m e^{-ax^2} &= \frac{\Gamma(\frac{m+1}{2})}{2a^{(m+1)/2}} \end{aligned}$$