Qualche Esercizio: Atomi idrogenoidi

Esercizio 1:

Si calcolino i seguenti valori di aspettazione per lo stato fondamentale di un atomo idrogenoide:

a) $\langle \hat{\mathrm{r}} \rangle$

b) $\langle \hat{\mathrm{r}}^2 \rangle$

c) $\langle \hat{\mathrm{T}} \rangle$

d) $\langle \hat{\mathrm{V}} \rangle$

Equazione di Schrödinger in coordinate sferiche:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\psi}{\partial r}\right)+\frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\psi}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{r^2\sin^2\theta}\left(\frac{\partial^2\psi}{\partial\phi^2}\right)\right]-\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}\psi=E\psi$$

Equazione radiale:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2R}{dr^2}+\left[-\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}+\frac{\hbar^2}{2m}\frac{l(l+1)}{r^2}\right]R=ER$$

Equazione angolare:

$$\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial Y}{\partial\theta}\right)+\frac{\partial^2 Y}{\partial\phi^2}=-l(l+1)\sin^2\theta\, Y$$

Autovalori:

$$E_n=-\left[\frac{m}{2\hbar^2}\left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\right)^2\right]\frac{1}{n^2}=\frac{E_1}{n^2}$$

-13.6 eV

Si verifichi inoltre che

e) l'errore sulla posizione r, calcolato come scarto quadratico medio, è pari a $\frac{\sqrt{3}}{2}\frac{a_0}{Z}$

f) per l'atomo idrogenoide vale il teorema del Viriale:

[*Dato un potenziale della forma* $V(x)=kx^{\alpha}$, *si ha che* $\langle\hat{T}\rangle=\frac{\alpha}{2}\langle\hat{V}\rangle$]

Esercizio 2:

All'istante t = 0, un atomo di idrogéno si trova nello stato

$$\Psi(\mathbf{r},0) = \frac{1}{\sqrt{10}}\left(2\psi_{100} + \psi_{210} + \sqrt{2}\psi_{211} + \sqrt{3}\psi_{21-1}\right)$$

dove ψ_{nlm} sono le autofunzioni dell'Hamiltoniana dell'atomo di idrogeno (ignorare lo spin).

a) Calcolare il valore di aspettazione dell'energia di questo sistema

b) Calcolare la probabilità di trovare il sistema con $l = 1, m = +1$ in funzione del tempo

c) Calcolare la probabilità di trovare l'elettrone entro un raggio di 10^{-10} cm dal protone, al tempo $t = 0$ e $t > 0$.

[Nel calcolo, si approssimino gli integrandi al primo ordine in r. Questa approssimazione è ragionevole?]

Esercizio 3:

Il trizio è un isotopo dell'idrogeno, il cui nucleo è costituito da due neutroni e un protone. È radioattivo e decade in un nucleo di ^3He (due protoni, un neutrone) dopo 12 anni, in media. Il processo di decadimento emette un elettrone ad alta energia che riesce a sfuggire al potenziale coulombiano.

Supponiamo che il processo sia istantaneo e che la funzione d'onda del trizio resti costante durante il processo stesso.

a) Si indichi con P_{nlm} la probabilità che l'elettrone dell' He^+ si trovi nello stato nlm dopo il decadimento. Si calcoli P100 e P200. (prima del decadimento l'elettrone si trova nello stato fondamentale)
b) Si indichi per quali valori di nlm si ottiene Pnlm diversa da zero
c) Supponiamo per semplicità che l'elettrone decada nello stato $|\psi\rangle = c_1|100\rangle_{He} + c_2|200\rangle_{He}$ a t=0. Quanto vale $\psi(t)$ per t>0?
d) Si calcoli r(t) per t>0

Formule utili:

Funzioni radiali dell'atomo idrogenoide:

$$R_{10} = 2\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} e^{-Zr/a_0}$$

$$R_{20} = 2\left(\frac{Z}{2a_0}\right)^{3/2}\left(1-\frac{Zr}{a_0}\right)e^{-Zr/2a_0}$$

Armoniche sferiche:

$$Y_{00} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$

Integrale notevole

$$\int_0^{+\infty} x^n e^{-px}\,dx = \frac{n!}{p^{n+1}}$$

Esercizio 4:

Un elettrone si muove in un campo coulombiano centrato all'origine delle coordinate. Trascurando effetti di spin e correzioni relativistiche, il primo stato eccitato (n=2) è 4 volte degenere.

Si considerino gli effetti di un potenziale non centrale Vpert=f(r)xy, dove f(r) è una funzione centrale che tende a zero "rapidamente" per $r \to +\infty$.

Si tratti la perturbazione al primo ordine e si calcoli il numero finale di livelli e la relativa degenerazione (N.B. non è necessario risolvere esplicitamente l'integrazione della parte radiale).

Funzioni d'onda radiali

$$R_{10} = 2\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} e^{-Zr/a_0}$$

$$R_{20} = 2\left(\frac{Z}{2a_0}\right)^{3/2} \left(1 - \frac{Zr}{a_0}\right) e^{-Zr/2a_0}$$

$$R_{21} = \frac{1}{\sqrt{3}}\left(\frac{Z}{2a_0}\right)^{3/2} \left(\frac{Zr}{a_0}\right) e^{-Zr/2a_0}$$

Armoniche sferiche:

$$Y_{00} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$

$$Y_{1\pm1} = \mp\left(\frac{3}{8\pi}\right)^{\frac{1}{2}} sin\theta\, e^{\pm i\phi}$$

$$Y_{10} = \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/2} cos\theta$$

Esercizio 5:

Si consideri una particella di carica q e massa m in moto armonico lungo l'asse x. Supponiamo di accendere un campo elettrico debole $\mathcal{E}$ per cui l'energia potenziale è modificata di una quantità $H' = -q\mathcal{E}x$.

a) In questo caso l'equazione di Schrödinger può essere risolta esattamente, mediante un cambiamento di variabili: $y \equiv x - \frac{q\mathcal{E}}{m\omega^2}$. Trovare i valori delle energie.

b) Si consideri H' una piccola perturbazione e si risolva il problema in questa approssimazione e si mostri che i risultati sono coerenti con gli autovalori esatti, calcolati nel punto a)

Table 7.1: The Hermite Polynomials $H_v(x)$

$H_0 = 1$	$H_4 = 16x^4 - 48x^2 + 12$
$H_1 = 2x$	$H_5 = 32x^5 - 160x^3 + 120x$
$H_2 = 4x^2 - 2$	$H_6 = 64x^6 - 480x^4 + 720x^2 - 120$
$H_3 = 8x^3 - 12x$	$H_v(x) = (-1)^v e^{x^2} d^v/dx^v e^{-x^2}$

Table 7.2: The Harmonic Oscillator Wavefunctions

$$\psi_0 = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/4} e^{-\alpha x^2/2} \longleftarrow \text{pari in } x$$

$$\psi_1 = \sqrt{2}\left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/4} \alpha^{1/2} x e^{-\alpha x^2/2} \longleftarrow \text{dispari in } x$$

$$\psi_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/4} (2\alpha x^2 - 1) e^{-\alpha x^2/2}$$

$$\psi_3 = \sqrt{3}\left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/4} (2\alpha^{3/2}x^3/3 - \alpha^{1/2}x) e^{-\alpha x^2/2}$$

$$\psi_4 = \frac{1}{\sqrt{6}}\left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/4} (2\alpha^2 x^4 - 6\alpha x^2 + 3/2) e^{-\alpha x^2/2}$$

$$\psi_5 = \frac{1}{\sqrt{15}}\left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/4} (2\alpha^{5/2}x^5 - 10\alpha^{3/2}x^3 + 15\alpha^{1/2}x/2) e^{-\alpha x^2/2}$$

$$\psi_v = \left(\frac{1}{2^v v!}\right)^{1/2} \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/4} H_v(\alpha^{1/2}x) e^{-\alpha x^2/2}, \qquad \alpha = \mu\omega/\hbar$$

Esercizio 6:

Un atomo di idrogeno si trova in un campo elettrico $\mathcal{E}\hat{z}$ e un campo magnetico $B\hat{x}$.
Gli effetti dei due campi sono paragonabili.

a) Se l'atomo si trova nello stato n = 2, trovare quali elementi della matrice di perturbazione sono diversi da zero (al primo ordine).

b) Ottenere gli shift in energia dovuti alla perturbazione (non è necessario calcolare esplicitamente il contributo della funzione d'onda radiale).

N.B.

i. In entrambi i casi si trascurino gli effetti relativistici e lo spin dell'elettrone
ii. Il momento di dipolo magnetico vale $\boldsymbol{\mu} = \frac{e}{2mc}\mathbf{l}$, con $\mathbf{l}$ momento angolare $\quad \mathcal{H}'_B = -\vec{\mu}\cdot\vec{B}$
iii. Vale la relazione

$$\underbrace{(l_x \pm i l_y)}_{L_\pm} \underbrace{|l\,m\rangle}_{|Y_{lm}\rangle} = \hbar\sqrt{(l \mp m)(l \pm m + 1)}\,|l\,m \pm 1\rangle$$

Armoniche sferiche:

$$Y_0^0 = \left(\frac{1}{4\pi}\right)^{1/2}$$

$$Y_1^0 = \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/2} \cos\theta$$

$$Y_1^{\pm 1} = \mp\left(\frac{3}{8\pi}\right)^{1/2} \sin\theta e^{\pm i\phi}$$

$$Y_2^0 = \left(\frac{5}{16\pi}\right)^{1/2} (3\cos^2\theta - 1)$$

$$Y_2^{\pm 1} = \mp\left(\frac{15}{8\pi}\right)^{1/2} \sin\theta\cos\theta e^{\pm i\phi}$$