

**STRUTTURA DELLA MATERIA**  
**(L.S. Fisica computazionale)**  
**I homework: fisica atomica**  
**30 gennaio 2004**

1. Gli operatori di innalzamento  $L_+$  e abbassamento  $L_-$  definiti come segue:

$$L_{\pm} = L_x \pm iL_y$$

agiscono così:

$$L_{\pm} Y_{\ell m} = \{\ell(\ell + 1) - m(m \pm 1)\}^{1/2} \hbar Y_{\ell, m \pm 1}$$

Sfruttare questi operatori per calcolare i valori di aspettazione  $\langle L_x \rangle$  e  $\langle L_x^2 \rangle$  sullo stato  $\psi = \phi_{\ell m}$ , che è un autostato degli operatori del momento angolare  $L^2$  e  $L_z$ .

2. Considerare gli atomi idrogenoidi (H neutro,  $\text{He}^+$ ,  $\text{Li}^{++}$ , etc.) nel loro stato fondamentale, in cui la funzione d'onda è:

$$u(r) = \left( \frac{Z^3}{\pi a_0^3} \right)^{1/2} \exp\left(-\frac{Zr}{a_0}\right)$$

Dimostrare che:

- (a) il valore di aspettazione dell'energia potenziale è  $\langle V \rangle = 2E = -2Z^2 \text{ Ryd}$  ( $E$  è l'energia totale),
- (b) il valore di aspettazione dell'energia cinetica è  $\langle T \rangle = -E = Z^2 \text{ Ryd}$ ,
- (c) il valore di aspettazione di  $r$  è  $\frac{3a_0}{2Z}$ ,
- (d) e il valore più probabile di  $r$  è  $\frac{a_0}{Z}$ .

*Indicazioni:*

- a) l'operatore  $\nabla^2$  diventa  $\frac{\partial^2}{\partial r^2} + (2/r)\frac{\partial}{\partial r}$  quando agisce su una funzione che dipende solo da  $r$
- b) sono utili gli integrali:

$$\int_0^{\infty} r \exp(-\mu r) dr = \frac{1}{\mu^2}$$

$$\int_0^{\infty} r^2 \exp(-\mu r) dr = \frac{2}{\mu^3}$$

$$\int_0^{\infty} r^3 \exp(-\mu r) dr = \frac{6}{\mu^4}$$

*Commento:*

dai risultati (a) e (b) si vede che  $\langle T \rangle = -\frac{1}{2}\langle V \rangle$ . Questo è un caso speciale di un risultato generale, noto come **teorema del viriale**, che dice che per un sistema in uno stato stazionario con un potenziale  $V(r) \propto r^n$  si ha  $\langle T \rangle = -\frac{n}{2}\langle V \rangle$ .

3. Perché le soluzioni dell'equazione di Schroedinger per l'atomo di idrogeno sono riferite a un asse  $z$  nonostante il fatto che il potenziale sia a simmetria sferica ?
4. Calcolare la degenerazione (cioè il numero di possibili stati con la stessa energia) per le seguenti configurazioni elettroniche:
  - (a)  $1s^1 2p^1$
  - (b)  $3p^2$
5. Il *momento di dipolo* per un atomo a 1 elettrone è semplicemente proporzionale alla distanza elettrone-protoni, per cui l'operatore corrispondente è l'operatore moltiplicativo:

$$\mathbf{d} = -e\mathbf{r},$$

dove  $\mathbf{r}$  è la posizione dell'elettrone relativa al nucleo. Dimostrare che il valore di aspettazione di  $\mathbf{d}$  è nullo per tutti gli stati stazionari di un atomo idrogenoide.

6. Considerare la prima configurazione eccitata dell'atomo di Ossigeno:  $1s^2 2s^2 2p^3 3s^1$ . Usando il modello di schermo, stimare l'energia di estrazione  $3s$  dall'atomo di ossigeno in quella configurazione.

#### 7. Effetto Auger nell'atomo di Boro

Considerare lo ione  $B^+[1s^1 2s^2 2p^1]$  ottenuto per estrazione di uno dei due elettroni  $1s$  dall'atomo neutro in stato fondamentale. Questo ione può decadere per effetto Auger secondo la reazione



che comporta l'emissione di un elettrone con energia cinetica  $E_c$ .

- (a) Usando il modello di schermo, determinare l'energia totale dello ione  $B^+[1s^1 2s^2 2p^1]$ ,
- (b) quella dello ione  $B^{++}[1s^2 2s^1]$ .
- (c) Infine determinare l'energia cinetica  $E_c$  dell'elettrone Auger.