

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, He^+ , 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 ∇^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:

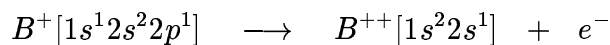
$$\mathbf{d} = -e\mathbf{r},$$

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.