

Formulario di  
*Meccanica Quantistica*

Guido Cioni

11 febbraio 2011



# Indice

1	Principi della meccanica quantistica	5
2	Equazione di Schroedinger 1-Dimensionale	11
3	Aspetti strutturali della Meccanica Quantistica	17
4	Momento angolare	23
5	Problemi 3-Dimensionali	29
6	Appendice	33



# Capitolo 1

## Principi della meccanica quantistica

**Stato Quantistico** Gli stati quantistici identificano lo stato in cui si trova una particella e vengono descritti da funzioni d'onda del tipo  $\psi(\{q\}, t) = \psi(x, y, z, t)$ .

**Probabilità**  $\psi$  é una distribuzione di probabilità quindi non c'è energia associata (come nelle onde E.M.).

$$dP = |\psi(\{q\}, t)|^2 \cdot d^3q \quad (1.1)$$

La probabilità deve essere normalizzata quindi deve valere la condizione

$$\int |\psi(\{q\}, t)|^2 \cdot d^3q = 1 \quad (1.2)$$

**Sovrapposizione di stati** Lo stato  $c\psi$ , ( $c \in \mathbb{C}$ ) é fisicamente equivalente a  $\psi$ . Se  $\psi_1, \psi_2$  sono due stati possibili per un sistema allora anche  $\psi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2$  lo é.

- $\psi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2 \leftrightarrow |\psi\rangle = c_1|\psi_1\rangle + c_2|\psi_2\rangle$ .
- Per due sistemi isolati la funzione d'onda complessiva é data dalla composizione  $\psi_{AB} = \psi_A \cdot \psi_B$ .
- Gli stati  $\psi$  e  $\psi \cdot e^{i\alpha}$  sono equivalenti poiché differiscono solo di una fase.

**Operatore Lineare** Ad ogni variabile dinamica classica é associato un operatore lineare con media data da

$$\langle q \rangle_\psi = \langle \psi | q | \psi \rangle = \int dq |\psi(q)|^2 q = \int dq \cdot \psi^*(q) q \psi(q) \quad (1.3)$$

La misura effettuata sperimentalmente deve assumere *in media* questo risultato.

- Per costruire stati in modo che lo scarto dalla media sia nullo occorre porre  $\langle \psi_n | \hat{f}^2 | \psi_n \rangle - \langle \psi_n | \hat{f} | \psi_n \rangle^2 = 0$  quindi bisogna ricercare degli *autostati*  $\psi_n$  tali che  $\hat{f}\psi_n = f_n\psi_n$
- Gli autostati  $\psi_n$  sono una base di autovettori, quindi ogni stato si scrive come combinazione di questi :

$$\psi(q) = \sum_n c_n \psi_n(q) \quad (1.4)$$

- La probabilità di trovare un determinato risultato nella misura di  $f$  é il modulo quadro della proiezione della funzione d'onda sulla relativa autofunzione, ovvero

$$P_n = |\langle \psi_n | \psi \rangle|^2 \quad (1.5)$$

- Un operatore é Hermitiano se  $\langle \psi | \hat{f} \phi \rangle = \langle \psi | \hat{f} \phi \rangle^* \equiv \langle \hat{f} \phi | \psi \rangle$  per ogni  $\psi, \phi \in H$ . Ad ogni variabile dinamica é associato un'operatore lineare ed Hermitiano.
- Gli autostati corrispondenti ad autovalori diversi di un operatore Hermitiano sono ortogonali.

**Proprietá degli operatori** Riportiamo alcune proprietá fondamentali degli operatori utilizzati in meccanica quantistica.

- Prodotto :  $fg\psi \equiv f(g\psi)$
- Commutatore :  $[f, g] \equiv fg - gf \neq 0$  in generale.
  1.  $[f, [g, h]] + [g, [h, f]] + [h, [f, g]] = 0$  .
  2.  $[f, gh] = g[f, h] + [f, g]h$ .
  3.  $[fg, h] = f[g, h] + [f, h]g$ .
  4.  $[f, g]^\dagger = -[f, g]$ .
  5.  $[x, \frac{d}{dx}]f(x) = -f(x)$  , per ogni  $f(x)$ .
  6.  $[f, g^k] = \frac{dg^k}{dg}$ .
  7. In particolare  $[x, f(p)] = i\hbar \frac{df}{dp}$  e  $[p, f(x)] = -i\hbar \frac{df}{dx}$ .
  8. Se  $[f, g] = c$  allora  $[e^{\lambda f}, g] = \lambda c e^{\lambda f}$ .
- Se due operatori  $f, g$  commutano allora esiste una base di stati ortonormali e completi  $\{\psi_n\}$  tali che  $f\psi_n = f_n\psi_n$  e  $g\psi_n = g_n\psi_n$ . Ovvero esistono autostati *simultanei* di  $f$  e  $g$ . I due operatori sono quindi due quantitá fisiche compatibili che possano assumere simultaneamente valori ben definiti.

**Operatori di  $p$  e  $q$**  Gli operatori di posizione e di impulso sono definiti rispettivamente da

- $\hat{q}\psi(q, t) = q\psi(q, t) \Rightarrow \hat{q} \rightarrow q$
- $\hat{p}\psi(q, t) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial q}\psi(q, t) \Rightarrow \hat{p} \rightarrow -i\hbar \vec{\nabla}$

**Indeterminazione di Heisenberg**  $\Delta q \cdot \Delta p \geq \hbar/2$ , ovvero non si possono misurare con la stessa precisione sia la posizione che l'impulso di una particella (pacchetto d'onda). Il pacchetto d'onda Gaussiano minimizza questa relazione di indeterminazione.

**Evoluzione di un sistema isolato** L'evoluzione di un sistema isolato si ricava dall'equazione di Schroedinger indipendente dal tempo

$$i\hbar \frac{d}{dt}\psi(q, t) = \hat{H}(\hat{q}, \hat{p}, t)\psi(q, t) \quad (1.6)$$

$\hat{H}$  é definito come operatore Hamiltoniano :  $\hat{H}(\hat{q}, \hat{p}, t)$ .

**Evoluzione di un sistema isolato (non dipendente dal tempo)**

$$\begin{cases} i\hbar \partial_t \psi_n(q, t) = \hat{H}(\hat{q}, \hat{p}, t)\psi_n(q, t) \\ H\psi_n = E_n\psi_n \end{cases} \Rightarrow i\hbar \partial_t \psi_n = E_n\psi_n \quad (1.7)$$

Quindi  $\boxed{\psi_n(t) = e^{-iE_n t/\hbar}\psi_n(0)}$ .

- $\psi = \sum_n a_n e^{-iE_n t/\hbar}\psi_n(0)$  dove  $a_n \equiv \langle \psi_n | \psi_n(0) \rangle$ .
- Nell'evoluzione temporale il valor medio delle osservabili cambia

$$\langle O \rangle_\psi = \langle \psi | O | \psi \rangle = \langle \psi | [O, H] | \psi \rangle \quad (1.8)$$

$$\langle O \rangle_\psi = 0 \Leftrightarrow O, H \text{ commutano} \quad (1.9)$$

**Autovalori Continui** La ricerca di autovalori soluzioni dell'equazione di Schroedinger pu essere fatta nel *discreto* ( $f_n$ ) o nel *continuo*. In quest'ultimo caso si cercano delle funzioni  $f$  tali che  $\hat{f}\psi_f(q) = f\psi_f(q)$

- Autostati relativi ad autovalori diversi sono ortogonali.
- La condizione di ortonormalità si pone con l'analogo della delta di Kroenecker nel caso continuo :  $\delta$  di Dirac.

$$\int dq \psi_f^*(q) \cdot \psi_{f'}(q) = \delta(f - f') \quad (1.10)$$

**Proprietá della delta di Dirac** Elenchiamo alcune proprietá della Delta di Dirac.

•

$$\delta(x) \equiv \begin{cases} 0, & \text{per } x \neq 0 \\ \infty, & \text{per } x = 0 \end{cases} \quad (1.11)$$

$$\bullet \quad \int_a^b \delta(x-c)g(x) dx = \begin{cases} g(c), & \text{se } a < c < b \\ 0, & \text{altrimenti} \end{cases} \quad (1.12)$$

- $\delta(-x) = \delta(x)$  ,  $x\delta(x) = 0$
- $\delta(ax) = \frac{\delta(x)}{|a|}$
- $\delta(f(x)) = \sum_{i=1}^n \frac{\delta(x-x_i)}{|f'(x_i)|}$
- $\int_0^\infty dx \delta(x)f(x) = f(0)/2$
- $\frac{d}{dx}\vartheta(x) = \delta(x)$  dove si é definita la funzione scalino

$$\vartheta(x) \equiv \begin{cases} 1, & \text{per } x \geq 0 \\ 0, & \text{per } x \leq 0 \end{cases} \quad (1.13)$$

La funzione  $\delta$  é il limite di alcune funzioni come  $\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{e^{-x^2/\epsilon^2}}{\sqrt{\pi}\epsilon}$  o  $\lim_{L \rightarrow \infty} \frac{\sin Lx}{\pi x}$ .

**Trasformata di Fourier :**

$$F(x) \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ikx} \hat{F}(k) dk ; \hat{F}(k) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikx} F(x) dx \quad (1.14)$$

**Autostati degli operatori di posizione/impulso** Gli autostati degli operatori  $\hat{p}, \hat{q}$  si possono trovare facilmente risolvendo le differenziali associate.

- $\hat{x}\psi_{x_0}(x) = x_0\psi_{x_0}(x) \Rightarrow \psi_{x_0}(x) = \delta(x - x_0)$
- $\hat{p}\psi_{p_0}(\vec{r}) = -i\hbar\nabla(\psi_{p_0}(\vec{r})) = p_0\psi_{p_0}(\vec{r}) \Rightarrow \psi_{p_0}(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{i\vec{p}_0 \cdot \vec{r}/\hbar}$ .

**Stati legati** La particella é confinata in una regione definita dello spazio, ovvero  $\psi \rightarrow 0$  per  $r \rightarrow \pm\infty$ . La funzione d'onda é normalizzabile, ovvero  $\|\psi\| = 1$  (autovalori discreti).

**Equazione di Schroedinger indipendente dal tempo**

$$H\psi = E\psi \Rightarrow \left\{ \frac{|\vec{p}|^2}{2m} + V(\vec{r}) \right\} = E\psi \Rightarrow \left\{ -\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m} + V(\vec{r}) \right\} \psi = E\psi \quad (1.15)$$

**Teorema 1.0.1** (Teorema di Ehrenfest).

*I valori medi degli operatori di posizione, impulso e del potenziale soddisfano alle relazioni seguenti*

$$\frac{d}{dt}\langle m\vec{r} \rangle = \langle \vec{p} \rangle ; \frac{d}{dt}\langle \vec{p} \rangle = -\langle \nabla V \rangle. \quad (1.16)$$

**Equazione di Continuitá** La funzione d'onda ha un'intepretazione probabilistica , possiamo quindi associare un flusso di probabilitá definito da

$$\frac{\partial |\psi|^2}{\partial t} = -\nabla \cdot \left\{ \frac{i\hbar}{2m} ((\nabla\psi^*)\psi - \psi^*(\nabla\psi)) \right\} \equiv -\nabla \cdot \vec{J} \quad (1.17)$$

Ovvero

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V |\psi|^2 dV = - \oint_{\partial V} \vec{J} \cdot d\vec{S} \quad (1.18)$$

**Teorema 1.0.2** (Teorema del Viriale (quantistico)).

*I valori medi degli operatori Hamiltoniani sono legati dalla relazione*

$$2\langle \psi_n | \frac{|\vec{p}|^2}{2m} | \psi_n \rangle = \langle \psi_n | \vec{r} \cdot \vec{\nabla} V | \psi_n \rangle \quad (1.19)$$

**Teorema 1.0.3** (Teorema di Feynman).

*Sia  $H(q, p; g)$  un Hamiltoniana descrivente un certo sistema con  $H = H_0 + V(g)$ . Allora se  $E_n(g)$  sono gli autovalori di  $H$  si ha che*

$$\frac{\partial E_n}{\partial g} = \left\langle \frac{\partial V}{\partial g} \right\rangle_n \quad (1.20)$$



## Capitolo 2

# Equazione di Schroedinger 1-Dimensionale

L'equazione di Schroedinger unidimensionale risulta molto importante in quanto problemi fisici in 3 dimensioni si possono ricondurre allo studio di 3 diverse equazioni di S. unidimensionali.

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right) \psi(x) = E\psi(x) \quad (2.1)$$

Questa equazione differenziale deve essere risolta

1. Trovando i valori  $E_n$  per cui esistono soluzioni (ricerca dello spettro)
2. Trovando le  $\psi_n$ , autofunzioni relative agli  $E_n$ , con le condizioni
  - (a)  $\|\psi(x)\| = 1 \Rightarrow$  stati legati, ovvero autovalori  $E_n$  discreti.
  - (b) Altrimenti se  $\|\psi(x)\| > +\infty$  basta richiedere che  $\psi$  si mantenga limitata all'infinito (parte continua dello spettro), ovvero che appartenga all'insieme  $S = \{\psi(x) : \lim_{|x| \rightarrow \infty} x^N \cdot \psi(x) = 0, \forall N\}$ .

**Proprietá dell'equazione di S.** Elenchiamo alcune proprietá utili nella risoluzione dell'equazione di S. per sistemi unidimensionali.

- Le funzioni  $\psi, \nabla\psi$  sono continue  $\forall n$
- Dall'equazione (2.1) si ricava la forma

$$\psi'' = -\frac{2m(E - V(x))}{\hbar^2} \psi \quad (2.2)$$

. La regione classicamente accessibile é quella in cui  $V(x) < E$  : in questa regione c'è un'oscillazione stabile. Nella zona non classicamente accettabile invece  $E > V(x)$  c'è un andamento instabile.

12CAPITOLO 2. EQUAZIONE DI SCHROEDINGER 1-DIMENSIONALE

•

**Teorema 2.0.4** (Teorema di non degenerazione).

Ad ogni autovalore  $E_n$  discreto corrisponde un solo autostato  $\psi_n$

•

**Teorema 2.0.5** (Teorema di Oscillazione).

La funzione d'onda dell' $n$ -esimo livello energetico discreto ha  $(n-1)$  zeri.

**Particella Libera** Bisogna risolvere l'equazione

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi'' = E\psi \Rightarrow \psi'' = -k^2\psi, \text{ con } k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}, (E \geq 0). \quad (2.3)$$

1. Se  $E \geq 0$  ci sono soluzioni limitate e  $\psi(x) = e^{\pm ikx} \Rightarrow \psi = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$ .

$$E = \frac{k^2\hbar^2}{2m}$$

2. Se  $E \leq 0$  non ci sono soluzioni normalizzabili e limitate.
3. Se la particella é vincolata su una circonferenza di raggio  $L$  allora

$$E_n = \frac{(2\pi n)^2\hbar^2}{2mL^2}$$

**Buche di potenziale** Si risolve l'equazione di Schroedinger in tutto lo spazio rispettando le condizioni al contorno.

1. Buca infinitamente alta

$$\psi = \begin{cases} 0, & \text{fuori dalla buca} \\ \sin(kx), & \text{dentro la buca} \end{cases} \quad k = n\pi/a \Rightarrow E_n = \frac{k_n\hbar^2}{2m} = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}n^2 \quad (2.4)$$

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{\pi n}{a} x \quad (2.5)$$

2. Buca di profondità finita : Gli stati legati soddisfano il sistema

$$\begin{cases} \xi \tan \xi = \eta, & n \text{ pari} \\ \xi \cot \xi = -\eta, & n \text{ dispari} \\ \xi^2 + \eta^2 = \frac{ma^2V_0}{2\hbar^2} \end{cases}, \text{dove } \xi \equiv \frac{\sqrt{2m(V_0 - |E|E)}}{2\hbar} a \text{ e } \eta \equiv \frac{\sqrt{2m|E|}}{2\hbar} a \quad (2.6)$$

Si risolve graficamente.

**Oscillatore Armonico** L'Hamiltoniana é  $H = p^2/2m + m\omega^2 x^2/2$ , quindi bisogna risolvere

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - m\omega^2 x^2/2)\psi = 0$$

. Si ricavano gli autovalori

$$E_n = \frac{\omega\hbar}{2}(2n + 1) = \omega\hbar(n + 1/2)$$

. La funzione d'onda dell' $n$ -esimo stato é data da

$$\psi_n(x) = \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{1/4} \left(\frac{1}{2^n n!}\right)^{1/2} H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right) e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$$

**Operatori di creazione e distruzione** Si definiscono rispettivamente l'operatore di distruzione e creazione come

$$\begin{cases} a \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x + i\sqrt{\frac{1}{2m\omega\hbar}}p \\ a^\dagger \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x - i\sqrt{\frac{1}{2m\omega\hbar}}p \end{cases} \quad (2.7)$$

Invertendo gli operatori si ha

$$\begin{cases} x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(a + a^\dagger) \\ p = -i\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}(a - a^\dagger) \end{cases} \quad (2.8)$$

Applicando questo operatore allo stato  $n$ -esimo si ha ( $\psi_n \equiv n$ )

$$a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle; a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle.$$

**Numero di occupazione** Conta il numero di *fononi* nello stato sul quale agisce

$$\mathcal{N} \equiv a^\dagger a$$

**Operatori  $a, a^\dagger$  per oscillatore armonico** Con gli operatori di creazione e distruzione la formulazione delle soluzioni per l'oscillatore armonico diventa piú elegante.

$$\begin{cases} Ha|E\rangle = (E - \hbar\omega)a|E\rangle \\ Ha^\dagger|E\rangle = (E + \hbar\omega)a^\dagger|E\rangle \\ H = \omega\hbar(aa^\dagger + 1/2) \end{cases} \Rightarrow E_n = \hbar\omega(n + 1/2) \quad (2.9)$$

Gli autostati corrispondenti ad  $E_n$  sono dati dalla formula

$$|n\rangle = \frac{(a^\dagger)^n}{\sqrt{n!}}|o\rangle \quad (2.10)$$

dove  $|o\rangle$  é lo stato fondamentale in cui  $H|o\rangle = \hbar\omega/2|o\rangle$

**Stati Coerenti** L'indeterminazione  $\Delta x \cdot \Delta p$  assume il minimo valore : sono i pacchetti d'onda piú compatti possibili. Per questi valgono quindi le proprietá seguenti.

1.  $(\Delta x)^2(\Delta p)^2 = \hbar^2/4$
2. La funzione d'onda in questi stati é una Gaussiana

$$\psi(x) = \mathcal{N} \exp\left(-\frac{(x-x_0)^2}{2\hbar} m\omega\right) \exp(p_0 x) \quad (2.11)$$

ove sono stati definiti

$$x_0 \equiv \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}} \Re(\beta) ; p_0 \equiv \sqrt{2m\omega\hbar} \Im(\beta)$$

e  $\beta$  é l'autovalore dell'equazione di S.

3. L'evoluzione temporale delle  $\psi$  sempre uno stato coerente poiché é equivalente a meno di una fase :  $|\beta(t)\rangle = e^{-i\omega t/2} |e^{-i\omega t}\beta\rangle$ .

**Processo d'urto** Processo in cui una particella libera attraversa una zona di potenziale che varia con la posizione. La funzione d'onda subisce quindi una modificazione nel passaggio. L'onda *incidente*  $\psi_{\vec{k}} = A e^{i\vec{k}\vec{x}}$ ,  $A = m/\hbar|\vec{k}|$  viene divisa in onda *riflessa*  $\propto e^{-ikx}$  e onda *trasmessa*  $\propto e^{ikx}$ .

**Barriera di potenziale** In questa condizione il potenziale é dato da

$$V = \begin{cases} 0, & \text{per } x < 0, x > a \\ V_0 > 0, & \text{per } 0 \leq x \leq a \end{cases}$$

1. Se  $E > V_0$  le soluzioni sono

$$\psi_I = e^{ikx} + A e^{-ikx} \text{ con } k = \sqrt{2mE}/\hbar \quad (2.12)$$

$$\psi_{II} = B e^{ik'x} + B' e^{-ik'x} \text{ con } k' = \sqrt{2m(E-V_0)}/\hbar \quad (2.13)$$

$$\psi_{III} = C e^{ikx} \text{ solo onda trasmessa} \quad (2.14)$$

Imponendo la continuitá si ricava

$$D \equiv \frac{|J_{tras}|}{|J_{inc}|} = \frac{4k^2 k'^2}{4k^2 k'^2 + (k^2 - k'^2)^2 \sin^2(k'a)} \quad (2.15)$$

$$R \equiv \frac{|J_{rifl}|}{|J_{inc}|} = \frac{(k^2 - k'^2)^2 \sin^2 k'a}{4k^2 k'^2 + (k^2 - k'^2)^2 \sin^2 k'a} \quad (2.16)$$

- (a)  $D + R = 1$  e  $D \neq 0$  : diversamente da quanto succede classicamente c' é la possibilitá che la particella attraversi la barriera (*effetto tunnel*).

(b) Per  $E \gg V_0$ ,  $D \rightarrow 1$ ,  $R \rightarrow 0$ .

(c) Per  $\sqrt{2m(E - V_0)}a/\hbar = n\pi$   $D = 1$ .

2. Se  $E < V_0$  le soluzioni sono

$$\psi_I = e^{ikx} + A e^{-ikx} \quad (2.17)$$

$$\psi_{II} = B e^{-\kappa x} + B' e^{\kappa x} \text{ con } \kappa \equiv \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar \quad (2.18)$$

$$\psi_{III} = C e^{ikx} \quad (2.19)$$

Quindi

$$D = \frac{4k^2\kappa^2}{4k^2\kappa^2 + (k^2 + \kappa^2)^2 \sinh^2 \kappa a} \quad (2.20)$$

$$R = \frac{(k^2 + \kappa^2)^2 \sinh^2 \kappa a}{4k^2\kappa^2 + (k^2 + \kappa^2)^2 \sinh^2 \kappa a} \quad (2.21)$$

(a)  $D > 0$  sempre.

(b) Se  $V_0 \rightarrow \infty$  o  $a \rightarrow \infty$  allora  $D \sim e^{-2\sqrt{2m(V_0-E)}a/\hbar}$ .

(c) Lo spostamento di coordinate provoca la comparsa di una fase.

**Gradino di potenziale** Il potenziale in questo caso si esprime come

$$V = \begin{cases} 0 & \text{se } x < 0 \\ V_0 & \text{se } x \geq 0 \end{cases} \quad (2.22)$$

1. Se  $E < V_0$  le soluzioni sono date da

$$\psi_I = e^{ikx} + A e^{-ikx} \text{ con } k = \sqrt{2mE}/\hbar \quad (2.23)$$

$$\psi_{II} = C e^{-\kappa x} \text{ con } \kappa = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar \quad (2.24)$$

In questo caso  $R = 1$  e  $D = 0$ .

2. Se  $E > V_0$  si hanno le soluzioni

$$\psi_I = e^{ikx} + A e^{-ikx} \text{ con } k = \sqrt{2mE}/\hbar \quad (2.25)$$

$$\psi_{II} = C e^{ik'x} \text{ con } k' = \sqrt{2m(E - V_0)}/\hbar \quad (2.26)$$

Ponendo le condizioni al contorno si ricava

$$D = \frac{4kk'}{(k + k')^2} \quad (2.27)$$

$$R = \frac{(k - k')^2}{(k + k')^2} \quad (2.28)$$

**Buca di potenziale  $\delta$**  In questo caso  $V(x) = -g\delta(x)$  con  $g > 0$ . Le condizioni al contorno da porre sono

$$\begin{cases} \psi(0_-) = \psi(0_+) \equiv \psi(0) \\ \psi'(0_+) - \psi'(0_-) = -\frac{2mg}{\hbar^2}\psi(0) \end{cases} \quad (2.29)$$

1. Se  $E < 0$  (spettro discreto)

$$\psi(x) = \sqrt{k} \left( \vartheta(x) e^{kx} + \vartheta(x) e^{-kx} \right) \quad \text{con } k \equiv \sqrt{\frac{-2mE_0}{\hbar^2}}$$

2. Se  $E \geq 0$  (spettro continuo)

$$\psi(x) = \vartheta(-x) \left[ A e^{ik'x} + B e^{-ik'x} \right] + \vartheta(x) \left[ C e^{ik'x} + D e^{-ik'x} \right]$$

con  $k' = \sqrt{2mE/\hbar^2}$ . Le ampiezze sono legate dalla matrice di transizione

$$\begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 + i\alpha & i\alpha \\ -i\alpha & 1 - i\alpha \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} \quad (2.30)$$

**Barriera di potenziale  $\delta$**  E' simile al caso precedente, ma stavolta  $g < 0$ . Non ci sono stati legati e lo stato di diffusione generale é espresso dalla stessa  $\psi$  con i coefficienti del caso precedente.

$$D = \frac{1}{1 + \alpha^2} \quad (2.31)$$

$$R = \frac{\alpha^2}{1 + \alpha^2} \quad (2.32)$$

## Capitolo 3

# Aspetti strutturali della Meccanica Quantistica

**Postulati** Valgono i seguenti postulati

1. Ad ogni sistema quantistico è associato uno spazio di Hilbert separabile  $\mathcal{H}$ . Ogni stato quantistico è un vettore unitario in  $\mathcal{H}$  a meno di una fase.
2. Ad ogni osservabile  $A$  corrisponde un operatore aggiunto  $\hat{A}$  in  $\mathcal{H}$ .
3. Il valor medio di un'osservabile  $A$  su uno stato quantistico è dato da  $\langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle$ .
4. L'evoluzione temporale si trova con l'operatore aggiunto Hamiltoniano.

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = H |\psi\rangle$$

5. Alle variabili  $q, p$  sono associati operatori  $\hat{q}, \hat{p}$  che rispettano le regole di commutazione  $[\hat{q}, \hat{p}] = i\hbar$ .

**Prodotto scalare** Nella metrica degli spazi di Hilbert il prodotto scalare è rappresentato da un integrale di Lebesgue

$$\langle \phi | \psi \rangle \equiv \int dy \phi^*(y) \chi(y) \quad (3.1)$$

In particolare

$$\langle q | q' \rangle = \int dx \delta(q - x) \delta(q' - x) = \delta(q - q') \quad (3.2)$$

**Rappresentazione degli impulsi** Per passare dalla rappresentazione delle coordinate a quella degli impulsi basta calcolare la trasformata di Fourier.

$$\tilde{\psi}(p) = \langle p|\psi \rangle = \int dx f_p^*(x)\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dx e^{-ipx/\hbar}\psi(x) \quad (3.3)$$

Le relazioni fondamentali stavolta sono

$$\hat{p} = p \quad (3.4)$$

$$\hat{x} = i\hbar \frac{\partial}{\partial p} \quad (3.5)$$

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar \quad (3.6)$$

**Oscillatore armonico** Nella rappresentazione degli impulsi l'oscillatore armonico si può studiare con l'Hamiltoniana

$$H = \frac{p^2}{2m} - \frac{1}{2}m\omega^2\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial p^2}$$

ottenendo le soluzioni

$$\psi(p) = \langle p|n \rangle = \frac{C_n}{\alpha\sqrt{\hbar}} (-i)^n H_n\left(\frac{p}{\alpha\hbar}\right) e^{-p^2/2\alpha^2\hbar^2}$$

**Operatori e variabili dinamiche**  $F \Rightarrow \hat{F}$  operatore lineare  $\in \mathcal{H}$  tale che  $\hat{F} : \psi \rightarrow \hat{F}\psi \in \mathcal{H}$

- $\hat{F}$  é Hermitiano
- $\hat{F}$  é limitato se  $\forall \psi \in \mathcal{H} \exists C < +\infty$  tale che  $\|\hat{F}\psi\| < C\|\psi\|$ . In Meccanica Quantistica si utilizzano operatori NON limitati.

**Commutatori** Valgono le seguenti proprietà sui commutatori principali.

- $[q, p] = i\hbar$
- $[p, q^n] = -ni\hbar q^{n-1}$
- $n\hbar\|q^{n-1}\| < 2\|pq^n\| \leq 2\|p\|\|q\|\|q^{n-1}\|$

**Coniugato Hermitiano, Operatori hermitiani** Siano  $\psi \in D(\hat{F})$ ,  $\phi \in \mathcal{H}$ , allora se esiste  $|\eta\rangle \in \mathcal{H}$  tale che  $\langle \hat{F}\psi|\phi \rangle = \langle \psi, \eta \rangle$  possiamo definire il coniugato Hermitiano come  $|\eta\rangle \equiv \hat{F}^\dagger|\phi\rangle$ . Il coniugato é tale che

$$\langle \hat{F}\psi|\phi \rangle = \langle \psi|\hat{F}^\dagger|\phi \rangle$$

L'operatore Hermitiano ammette coniugato uguale all'operatore, ovvero  $\hat{F}^\dagger = \hat{F}$ : in questo caso i domini del coniugato hermitiano e dell'operatore coincidono.

**Spettro di un operatore autoaggiunto Spettro discreto**  $\hat{F}\psi_n = f_n\psi_n$   
con  $\|\psi_n\| = 1$

**Spettro continuo** Vale il criterio di *Weyl* :  $f$  fa parte dello spettro di  $\hat{F}$  se esiste una successione  $\{\psi_n\}$ ,  $\|\psi_n\| = 1$  , tale che

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \|\hat{F}\psi_n - f\psi_n\| = 0$$

**Operatori unitari** Un operatore  $U$  con dominio  $\mathcal{H}$  e immagine  $\mathcal{H}$  si dice unitario se  $\forall x, y \in \mathcal{H}$  ,

$$\langle Ux, Uy \rangle = \langle x, y \rangle$$

. Le proprietà di questi operatori si riassumono nel seguente elenco

- $U$  ammette inverso unitario.
- Ogni operatore unitario é lineare.
- $U^\dagger U = UU^\dagger = \mathbb{I}$  ;  $U^\dagger = U^{-1}$
- $\langle \phi | O | \psi \rangle = \langle \phi | U^\dagger O U | \psi \rangle = \langle \tilde{\phi} | \tilde{O} | \tilde{\psi} \rangle$  dove  $|\tilde{\psi}\rangle \equiv U|\psi\rangle$  ,  $|\tilde{\phi}\rangle \equiv U|\phi\rangle$  ,  $\tilde{O} \equiv U O U^\dagger$ . La trasformazione degli stati e degli operatori definiti da queste equazioni é chiamata trasformazione unitaria : gli stati e gli operatori in meccanica quantistica sono definiti a meno di trasformazioni unitarie.
- Gli autovalori di un operatore unitario hanno norma unitaria.
- Due autovettori relativi ad autovalori diversi sono ortogonali.

**Evoluzione temporale** L'evoluzione temporale del sistema in meccanica quantistica é una trasformazione unitaria ,

$$|\psi(t)\rangle = e^{-iHt/\hbar} |\psi(0)\rangle \quad (3.7)$$

Infatti l'equazione precedente é la soluzione formale dell'equazione di Schroedinger

$$\begin{cases} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = H |\psi(t)\rangle \\ |\psi(t)\rangle|_{t=0} = |\psi(0)\rangle \end{cases} \quad (3.8)$$

**Schema di Heisenberg** Si sceglie la trasformazione unitaria dipendente dal tempo data da  $U(t) = e^{iHt/\hbar}$ . Con questa lo stato e l'operatore  $O$  generico si trasformano in

$$|\psi\rangle_H = U(t)|\psi(t)\rangle_S = e^{iHt/\hbar} |\psi(t)\rangle_S = |\psi(0)\rangle_S \quad (3.9)$$

$$O_H(t) = U(t) O U(t)^\dagger = e^{iHt/\hbar} O e^{-iHt/\hbar} \quad (3.10)$$

In questa rappresentazione l'evoluzione temporale si ottiene con l'equazione

$$i\hbar \frac{dO_H}{dt} = i\hbar \frac{\partial O_H}{\partial t} + [O_H, H] \quad (3.11)$$

Valgono le proprietà seguenti

- $[q_{iH}(t), p_{jH}(t)] = i\hbar\delta_{ij}$
- $H_H = UH_SU^\dagger = H_S$

**Stati Misti** Talvolta, nel descrivere un sottosistema di un sistema formato da un numero elevato di componenti ( $\sim 10^{23}$ ) si ha accesso solo ad una parte delle variabili dinamiche quindi non è possibile utilizzare le funzioni d'onda : c'è quindi una mancanza di informazione completa sul sistema. Considerando quindi un sistema  $\Sigma$  , composto da un sottosistema  $S$  , la funzione d'onda del sistema totale non è fattorizzabile, ovvero

$$\Psi_\Sigma(\{x\}, \{q\}) \neq \psi_S(\{x\}) \cdot \psi_{\Sigma \setminus S}(\{q\})$$

**Matrice densità** Si utilizza per calcolare il valor medio di operatori che riguardano variabili di un sottosistema  $S \subset \Sigma$ : Si sceglie  $\Psi(x, q) = \sum_{j,\alpha} c_{j,\alpha} |j\rangle |\alpha\rangle$  con  $\{|j\rangle\}$  base di  $S$  e  $\{|\alpha\rangle\}$  base di  $\Sigma \setminus S$  e si calcola

$$\langle \hat{f} \rangle_\Psi = \langle \Psi | \hat{f} | \Psi \rangle = \sum_{j,\alpha} c_{j,\alpha}^* c_{k,\alpha} \langle j | \hat{f} | k \rangle = \sum_{j,k} \sum_{\alpha} (c_{k,\alpha} c_{j,\alpha}^*) \hat{f}_{jk} \equiv \sum_{jk} \rho_{kj} \hat{f}_{jk} \quad (3.12)$$

Abbiamo definito

$$\rho_{jk} \equiv \sum_{\alpha} c_{j,\alpha} c_{k,\alpha}^*$$

come matrice densità. Valgono le proprietà seguenti.

1. Il valore di aspettazione di una variabile (valor medio dell'operatore) è dato da

$$\langle \hat{f} \rangle_\Psi = \sum_{jk} \rho_{kj} \hat{f}_{jk} = \text{Tr}(\rho f)$$

2.  $\rho^\dagger = \rho$
3.  $\text{Tr} \rho = 1$
4.  $0 \leq \rho_{ij} \leq 1, \forall i = j$
5.  $|\rho_{jk}|^2 \leq \rho_{jj} \rho_{kk}$
6.  $\rho^2 \neq \rho$  in generale. Nel caso puro vale l'uguaglianza : in effetti gli stati puri sono una particolare classe di stati misti.

**Matrice statistica** È l'analogo della matrice densità nel caso di sistemi con molti gradi di libertà. Combinando la relazione statistica ,  $W_n = \frac{1}{\mathcal{N}} e^{-E_n/kT}$  , con la definizione dell' $n$ -esimo stato ,  $|n\rangle = \sum_j a_{n,j} |j\rangle$  si ottiene che il valor medio è dato da

$$\langle \hat{f} \rangle_n = \sum_{ij} w_{ij} f_{ji} = \text{Tr}(w f)$$

dove abbiamo definito la matrice statistica

$$w_{ij} \equiv \sum_n W_n a_{ni} a_{nj}^* \quad (3.13)$$

**Stati di polarizzazione del fotone** Si possono esprimere attraverso la matrice densità i due stati di polarizzazione del fotone ( $|1\rangle, |2\rangle$ ).

**Stato puro** La matrice densità per uno stato del tipo  $|\psi\rangle = c_1|1\rangle + c_2|2\rangle$  é data da

$$\begin{pmatrix} |c_1|^2 & c_1 c_2^* \\ c_1^* c_2 & |c_2|^2 \end{pmatrix} \quad (3.14)$$

**Stato misto** La matrice densità per uno stato di polarizzazione parziale si può scrivere utilizzando parametri di Stokes  $\xi_1$  (grado di polarizzazione lineare nelle direzioni che fanno angolo di  $\pm\pi/4$  con quelle di 1,2),  $\xi_2$  (misura delle polarizzazioni circolari),  $\xi_3$  (grado di polarizzazione nelle direzioni 1 e 2) e le matrici di Pauli  $\sigma_i$ .

$$\rho = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + \xi_3 & \xi_1 - i\xi_2 \\ \xi_1 + i\xi_2 & 1 - \xi_3 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} (\mathbb{I} + \sigma_i \xi_i) \quad (3.15)$$



## Capitolo 4

# Momento angolare

**Momento angolare** Si definisce il momento angolare classicamente ma utilizzando la formula quantistica per l'impulso.

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} = -i\hbar(\vec{r} \times \vec{\nabla}) \quad (4.1)$$

Separando le componenti si ha

$$\begin{cases} L_x = -i\hbar(y\partial_z - z\partial_y) \\ L_y = -i\hbar(z\partial_x - x\partial_z) \\ L_z = -i\hbar(x\partial_y - y\partial_x) \end{cases} \quad (4.2)$$

Ovvero

$$L_i = \varepsilon_{ijk}x_jp_k \text{ dove } \varepsilon_{ijk} \equiv \begin{cases} 1 \text{ se } (ijk) = (123), (231), (312) \\ -1 \text{ se } (ijk) = (321), (132), (213) \\ 0 \text{ altrimenti} \end{cases} \quad (4.3)$$

Si é definito (e si utilizzerá nel seguito)  $(x, y, z) \equiv (1, 2, 3)$ .

**Commutatori** Valgono i seguenti commutatori

$$[L_i, L_j] = i\hbar\varepsilon_{ijk}L_k \implies \begin{cases} [L_1, L_2] = i\hbar L_3 \\ [L_2, L_3] = i\hbar L_1 \\ [L_3, L_1] = i\hbar L_2 \end{cases} \quad (4.4)$$

- Le componenti del momento angolare sono operatori Hermitiani.

$$\begin{cases} [L_i, x_j] = i\hbar\varepsilon_{ijk}x_k \\ [L_i, p_j] = i\hbar\varepsilon_{jik}p_k \end{cases} \quad (4.5)$$

- Se si definisce  $\vec{L}^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2$  allora  $[\vec{L}^2, L_i] = 0$  per  $i = 1, 2, 3$

- $\vec{L}^2$  ed  $L_3$  possono avere simultaneamente misure definite

**Momento angolare orbitale** In generale il momento angolare totale si indica con  $\vec{J}$  ed é composto dallo spin,  $S$  e dal momento angolare orbitale,  $L$ . Per  $J$  valgono le stesse proprietá giá dimostrate per  $L$ .

**Operatori di salita e discesa per  $L$**  Si possono definire gli operatori di salita e discesa seguenti.

$$\begin{cases} L_+ \equiv L_1 + iL_2 \\ L_- \equiv L_1 - iL_2 \end{cases} \quad (4.6)$$

Valgono le seguenti proprietá, di immediata verifica.

$$\begin{cases} [L_+, L_-] = 2L_3 \\ [L_3, L_+] = L_+ \\ [L_3, L_-] = -L_- \end{cases} ; L^2 = L_+L_- + L_3^2 - L_3 = L_-L_+ + L_3^2 + L_3 \quad (4.7)$$

**Operatori di salita e discesa per  $J$**  Si definiscono in maniera analoga a quanto giá visto per  $L$  e godono delle seguenti proprietá.

- $J_{\pm}|j, m\rangle = \sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)}|j, m \pm 1\rangle$
- $[J_{\pm}, J^2] = 0 \Rightarrow J^2(J_{\pm}^n|m\rangle) = J_{\pm}^n J^2|m\rangle = m'(J_{\pm}^n|m\rangle)$ . Per un dato valore di  $m'$  esiste un valore massimo per  $m$  dato da  $\max m = j$  tale che

$$J^2|j\rangle = j(j+1)|j\rangle$$

. Gli stati  $J_{\pm}^n|m\rangle$  formano una base di autostati di  $J^2$ .

- Gli autovalori del momento angolare sono quantizzati, ovvero

$$j = 0, 1/2, 1, 3/2, \dots$$

**Elementi di matrice** Per  $J_1$  valgono le seguenti

$$\begin{aligned} \langle j, m-1|J_1|j, m\rangle &= \frac{1}{2}\sqrt{(j+m)(j-m+1)} \\ \langle j, m+1|J_1|j, m\rangle &= \frac{1}{2}\sqrt{(j+m+1)(j-m)} \\ &0, \text{ altrimenti} \end{aligned} \quad (4.8)$$

Per  $J_2$  si ottiene

$$\begin{aligned} \langle j, m-1|J_2|j, m\rangle &= \frac{i}{2}\sqrt{(j+m)(j-m+1)} \\ \langle j, m+1|J_2|j, m\rangle &= -\frac{i}{2}\sqrt{(j+m+1)(j-m)} \\ &0, \text{ altrimenti} \end{aligned} \quad (4.9)$$

Per  $J_3$  gli unici elementi non nulli sono

$$\langle j, m | J_3 | j, m \rangle = m \quad (4.10)$$

**Operatori e coordinate sferiche** In coordinate sferiche gli operatori si scrivono come

$$\begin{cases} L^2 = - \left\{ \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \partial_{\vartheta} (\sin \vartheta \partial_{\vartheta}) + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \partial_{\varphi}^2 \right\} \\ L_+ = e^{i\varphi} \{ \partial_{\vartheta} + i \cot \vartheta \partial_{\varphi} \} \\ L_- = e^{-i\varphi} \{ -\partial_{\vartheta} + i \cot \vartheta \partial_{\varphi} \} \end{cases} \quad (4.11)$$

**Armoniche Sferiche** Si tratta di risolvere il sistema

$$\begin{cases} L^2 \Phi(\vartheta, \varphi) = \ell(\ell + 1) \Phi(\vartheta, \varphi) \\ L_z \Phi(\vartheta, \varphi) = m \Phi(\vartheta, \varphi) \end{cases} \quad \text{dove } \Phi(\vartheta, \varphi) \equiv \Phi_m(\varphi) \Theta_{\ell, m}(\vartheta) \quad (4.12)$$

Le equazioni si disaccoppiano : la soluzione per  $\varphi$  é un'onda mentre quella per  $\vartheta$  si puó scrivere in funzione dei polinomi di Legendre. Si ottiene quindi

$$\Phi(\vartheta, \varphi) \equiv Y_{\ell, m} = (-1)^{\frac{m+|m|}{2}} \sqrt{\frac{(2\ell + 1)(\ell - |m|)!}{4\pi(\ell + |m|)!}} P_{\ell}^{|m|}(\cos \vartheta) e^{im\varphi} \quad (4.13)$$

Le armoniche sferiche godono delle seguenti proprietá

- $Y_{\ell, m}(\pi - \vartheta, \varphi + \pi) = (-1)^{\ell} Y_{\ell, m}(\vartheta, \varphi)$
- $Y_{\ell, m}^* = (-1)^m Y_{\ell, -m}$

**Matrici di Pauli** Per le particelle a spin  $1/2$ ,  $j = 1/2$  si possono definire le matrici di Pauli, che rappresentano l'insieme degli elementi di matrice di  $J_i$ .

$$\sigma_1 \equiv \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}; \quad \sigma_2 \equiv \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}; \quad \sigma_3 \equiv \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (4.14)$$

Le matrici di Pauli godono delle seguenti proprietá

- $[\sigma_i/2, \sigma_j/2] = i\varepsilon_{ijk} \sigma_k/2$
- $\sigma_i^2 = \mathbb{I}$
- $\sigma_i \sigma_j = -\sigma_j \sigma_i = i\varepsilon_{ijk} \sigma_k (i \neq j)$

**Spinori** Vengono definiti due spinori di base

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = |1/2, 1/2\rangle \equiv |\uparrow\rangle; \quad \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = |1/2, -1/2\rangle \equiv |\downarrow\rangle \quad (4.15)$$

attraverso i quali si possono scrivere tutti gli elementi dello spazio , indicati con

$$\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = c_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + c_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (4.16)$$

**Composizione dei momenti angolari** Dato un sistema formato da due particelle con stati  $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle$  la funzione d'onda del sistema é data da (considerando stati puri)  $|\psi\rangle = |\psi_1\rangle|\psi_2\rangle$ . I momenti angolari si sommano

$$\vec{J} = \vec{J}_1 + \vec{J}_2 ; [J_i, J_j] = i\varepsilon_{ijk}J_k$$

Per studiare gli autovalori si possono scegliere due basi

1. La base in cui sono diagonali  $J_1^2, J_2^2, J_{1z}, J_{2z}$ .

- Si scelgono i vettori di base  $|j_1, j_2, m_1, m_2\rangle$
- Valgono le equazioni agli autovalori

$$\begin{cases} J_1^2|j_1, j_2, m_1, m_2\rangle = j_1(j_1 + 1)\hbar^2|j_1, j_2, m_1, m_2\rangle \\ J_{1z}|j_1, j_2, m_1, m_2\rangle = m_1\hbar|j_1, j_2, m_1, m_2\rangle \end{cases} \quad (4.17)$$

e analogamente per  $J_2^2$  e  $J_{2z}$ .

2. La base in cui sono diagonali  $J_1^2, J_2^2, J^2, J_z$

- Si scelgono i vettori di base  $|j_1, j_2, J, M\rangle$
- Valgono le equazioni agli autovalori

$$\begin{cases} J_1^2|j_1, j_2, J, M\rangle = j_1(j_1 + 1)\hbar^2|j_1, j_2, J, M\rangle \\ J_2^2|j_1, j_2, J, M\rangle = j_2(j_2 + 1)\hbar^2|j_1, j_2, J, M\rangle \\ J^2|j_1, j_2, J, M\rangle = J(J + 1)\hbar^2|j_1, j_2, J, M\rangle \\ J_z|j_1, j_2, J, M\rangle = M\hbar|j_1, j_2, J, M\rangle \end{cases} \quad (4.18)$$

Segue

**Autovalori  $M$  di  $J_z$**  Poiché  $J_z = J_{1z} + J_{2z} \Rightarrow M = m_1 + m_2$ . Quindi all'autovalore  $m_1$  sono associati  $(2j_1 + 1)$  valori , mentre ad  $m_2$  corrispondono  $(2j_2 + 1)$  autovalori : in totale  $(2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$

**Autovalori  $J$  di  $J^2$**  Il valore massimo dei due momenti angolare é tale che  $J = j_1 + j_2$  :  $j_1$  e  $j_2$  assumono il valore della proiezione del momento angolare  $m_1, m_2$ . Quindi  $|j_1, j_2, m_1, m_2\rangle \longleftrightarrow |j_1, j_2, J = j_1 + j_2, M = m_1 + m_2\rangle$ . Il valore minimo possibile di  $J$  é  $|j_1 - j_2|$  , ovvero  $J$  può assumere i valori

$$J = j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1, \dots, |j_1 - j_2|$$

**Coefficienti di Clebsch-Gordan** Sono necessari per passare tra le due basi del momento angolare. Per ottenerli basta sviluppare gli stati di una base in termine dell'altra base e viceversa.

$$|j_1, j_2, m_1, m_2\rangle = \sum_{J, M} |j_1, j_2, J, M\rangle \langle j_1, j_2, J, M | j_1, j_2, m_1, m_2\rangle \quad (4.19)$$

$$|j_1, j_2, J, M\rangle = \sum_{m_1, m_2} |j_1, j_2, m_1, m_2\rangle \langle j_1, j_2, m_1, m_2 | j_1, j_2, J, M\rangle \quad (4.20)$$

Vale ovviamente

$$\langle j_1, j_2, J, M | j_1, j_2, m_1, m_2\rangle = \langle j_1, j_2, m_1, m_2 | j_1, j_2, J, M\rangle^* \quad (4.21)$$

**Spin** Rappresenta il momento angolare intrinseco delle particelle ( non é legato alla massa delle particelle). Per le particelle che possiedono spin non nullo la descrizione dello stato attraverso la funzione d'onda deve poter determinare la probabilità che lo spin della particella abbia direzione definita nello spazio.

$$\psi(\vec{r}) = \psi(\vec{r}, s) = \begin{pmatrix} \psi_1(\vec{r}) \\ \vdots \\ \psi_{2s+1}(\vec{r}) \end{pmatrix} \quad (4.22)$$

**Spin 1/2** Gli operatori si scrivono come

$$\begin{cases} S^2 = \hbar^2 s(s+1) = \hbar^2 3/4 \\ S_i = \sigma_i \hbar/2 \end{cases} \quad (4.23)$$

$$S_{\pm} = S_x \pm iS_y \Rightarrow S_+ = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}; S_- = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (4.24)$$

Valgono le proprietà

$$e^{i\vec{a}\cdot\vec{\sigma}} = \cos|\vec{a}| + i\frac{\vec{a}}{|\vec{a}|}\vec{\sigma}\sin|\vec{a}| \quad (4.25)$$

$$\vec{n}\cdot\vec{s} = \frac{1}{2}\vec{n}\cdot\vec{\sigma} \quad (4.26)$$



## Capitolo 5

# Problemi 3-Dimensionali

Si risolvono introducendo le nuove variabili

$$\begin{cases} \vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2 \\ \vec{R} = \frac{m_1\vec{r}_1 + m_2\vec{r}_2}{m_1 + m_2} \end{cases} \quad (5.1)$$

L'Hamiltoniana si trasforma quindi in

$$H = -\frac{\hbar^2}{2(m_1 + m_2)} \nabla_{\vec{R}}^2 - \frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_{\vec{r}}^2 + V(\vec{r}) \quad (5.2)$$

Dunque la funzione d'onda si divide in

$$\psi = \Phi(\vec{r})\phi(\vec{r})$$

**Simmetria Centrale** Nel caso di simmetria centrale  $V(\vec{r}) = V(r)$ . Si cercano quindi soluzioni della forma  $\psi(\vec{r}) = R(r)Y_{\ell,m}(\vartheta, \varphi)$ , composte da parte radiale e parte angolare con armoniche sferiche. Per la parte radiale si deve risolvere l'equazione

$$\left\{ \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{d}{dr} \right) + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(r)) - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right\} R(r) = 0 \quad (5.3)$$

che si risolve facilmente introducendo  $\chi(r) \equiv R(r)r$ . Si deve risolvere il sistema

$$\begin{cases} \frac{d^2\chi}{dr^2} + \left\{ \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(r)) - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right\} \chi(r) = 0 \\ \int_0^\infty dr |\chi|^2 = 1 \\ \chi(0) = 0 \end{cases} \quad (5.4)$$

Dunque ogni stato stazionario di un sistema 3D a simmetria centrale é identificato dalla terna di numeri quantici  $(n, \ell, m)$ .

**Particella libera** Si consideri il caso  $V = 0, \forall r$ . Si ottiene l'equazione

$$R'' + \frac{2}{r}R' + \left(k^2 - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2}\right)R = 0 ; k^2 = 2mE/\hbar^2 \quad (5.5)$$

- Se  $\ell = 0$  allora sono soluzioni le ONDE PIANE

$$\begin{cases} R = \frac{\sin kr}{r} \text{ regolare in } 0 \\ R = A' \frac{\cos kr}{r} \text{ singolare in } 0 \end{cases} \quad (5.6)$$

- Se  $\ell \neq 0$  si pone  $R_\ell = r^\ell \eta_\ell$  e si risolve

$$\eta_\ell'' + \frac{2(\ell+1)}{r}\eta_\ell' + k^2\eta_\ell = 0$$

Sono soluzioni le ONDE SFERICHE

$$\begin{cases} R_{k,\ell} = 2kj_\ell(kr) \\ Q_{k,\ell} = 2kn_\ell(kr) \end{cases} \quad (5.7)$$

dove si sono definite le funzioni di Bessel sferiche  $j_\ell(kr)$  e  $n_\ell(kr)$ .

**Funzioni di Bessel-Hankel** Si definiscono le funzioni di Bessel sferiche

$$\begin{cases} j_\ell(x) = (-1)^\ell x^\ell \left(\frac{1}{x} \frac{d}{dx}\right)^\ell \frac{\sin x}{x} \\ n_\ell(x) = (-1)^{\ell+1} x^\ell \left(\frac{1}{x} \frac{d}{dx}\right)^\ell \frac{\cos x}{x} \end{cases} \quad (5.8)$$

- Per  $x \rightarrow 0$ ,

$$j_\ell(x) \sim \frac{x^\ell}{(2\ell+1)!!} ; n_\ell \sim \frac{(2\ell-1)!!}{x^{\ell+1}}$$

- Per  $x \rightarrow \infty$ ,

$$j_\ell(x) \sim \frac{1}{x} \cos x - \frac{(\ell+1)\pi}{2} ; n_\ell \sim \frac{1}{x} \sin x - \frac{(\ell+1)\pi}{2}$$

Sono utili anche le seguenti definizioni di funzioni di Hankel sferiche

$$\begin{cases} h_\ell^{(1)}(x) \equiv j_\ell(x) + in_\ell(x) \\ h_\ell^{(2)}(x) \equiv j_\ell(x) - in_\ell(x) \end{cases} \quad (5.9)$$

Gli andamenti asintotici si ottengono utilizzando le funzioni di Bessel.

**Sviluppo in onde parziali** Le soluzioni per momenti angolari diversi si possono correlare tra di loro : un'onda piana si può sempre sviluppare in termine di onde sferiche utilizzando

$$e^{ikz} = e^{ikr \cos \vartheta} = \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) i^\ell j_\ell(kr) P_\ell(\cos \vartheta) \quad (5.10)$$

**Buca 3D** Prendiamo il potenziale a simmetria centrale

$$V(\vec{r}) = \begin{cases} -V_0 & \text{se } r < a \\ 0 & \text{altrimenti} \end{cases} \quad (5.11)$$

Si risolve l'equazione di Schroedinger , trovando le soluzioni

- Per  $r < a$

$$R_\ell^{(int)} = A j_\ell(kr) \text{ con } k \equiv \frac{2m(E + V_0)}{\hbar^2} > 0 \quad (5.12)$$

- Per  $r > a$

$$R_\ell^{(ext)} = B h_\ell^{(1)}(i\kappa r) \text{ con } k' = \frac{i\sqrt{-2mE}}{\hbar} \equiv i\kappa \quad (5.13)$$

Analogamente a quanto fatto per la buca unidimensionale si risolve l'equazione graficamente trovando che

- Per  $\sqrt{2mV_0a^2}/\hbar \leq \pi/2$  non ci sono stati legati
- Per  $\pi/2 \leq \sqrt{2mV_0a^2}/\hbar \leq 3\pi/2$  c'è un solo stato legato
- Per  $3\pi/2 \leq \sqrt{2mV_0a^2}/\hbar \leq 5\pi/2$  ci sono 2 livelli discreti

**Atomo di Idrogeno** L'Hamiltoniana dell'atomo di idrogeno si può scrivere come

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - \frac{e^2}{r} \text{ con } m \simeq m_e \quad (5.14)$$

L'equazione da risolvere è dunque

$$R'' + \frac{2}{r}R' - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2}R + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E + \frac{e^2}{r}\right)R = 0 \quad (5.15)$$

- Gli stati legati sono possibili solo con  $E < 0$  .
- La soluzione dell'equazione con il metodo delle serie di potenze porta alla condizione di quantizzazione dell'energia

$$E_n = -\frac{me^4}{2\hbar^2n^2} = \frac{e^2}{2n^2r_B} \text{ con } r_B \equiv \frac{\hbar^2}{me^2} \quad (n = 1, 2, 3...) \quad (5.16)$$

- L'n-esimo livello è  $\sum_{\ell=0}^{(n-1)} 2\ell + 1 = n^2$  volte degenerare.
- La soluzione per l'equazione radiale è data da

$$R_{n,\ell} = C_{n,\ell} \left(\frac{2}{nr_B}\right)^\ell r^\ell e^{-r/nr_B} L_{n+\ell}^{2\ell+1}\left(\frac{2r}{nr_B}\right) \quad (5.17)$$

ove

$$C_{n,\ell} = -\frac{2}{n^2r_B^{-3/2}} \sqrt{\frac{(n-\ell-1)!}{\{n+\ell\}!^3}} \quad (5.18)$$

e  $L_{n+\ell}^{2\ell+1}$  sono i polinomi associati di Laguerre.

Per i primi stati

- $R_{1,0}(r) = 2r_B^{-3/2} e^{-r/r_B}$
- $R_{2,0}(r) = \frac{1}{2\sqrt{2}} r_B^{-3/2} \left(2 - \frac{r}{r_B}\right) e^{-r/2r_B}$
- $R_{2,1}(r) = \frac{1}{2\sqrt{6}} r_B^{-3/2} \frac{r}{r_B} e^{-r/2r_B}$

Dal modello quantistico si ricava che il moto dell'elettrone nel nucleo é non relativistico ( $v \simeq c/137$ ) e che l'energia di ionizzazione é di circa  $14eV$



# Capitolo 6

# Appendice

### 35. CLEBSCH-GORDAN COEFFICIENTS, SPHERICAL HARMONICS, AND $d$ FUNCTIONS

Note: A square-root sign is to be understood over every coefficient, e.g., for  $-8/15$  read  $-\sqrt{8/15}$ . Notation:  $\begin{matrix} J & J & \dots \\ M & M & \dots \end{matrix}$  Coefficients

$Y_0^0 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta$      $2 \times 1/2 \begin{matrix} 5/2 & 5/2 & 3/2 \\ +3/2 & 3/2+3/2 \\ +2+1/2 & 1 \end{matrix}$      $\begin{matrix} m_1 & m_2 \\ m_1 & m_2 \\ \dots & \dots \\ \dots & \dots \end{matrix}$

$Y_1^1 = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{i\phi}$      $\begin{matrix} +2-1/2 & 1/5 & 4/5 & 5/2 & 3/2 \\ +1+1/2 & 4/5-1/5 & +1/2+1/2 \end{matrix}$

$Y_2^0 = \sqrt{\frac{15}{4\pi}} \left( \frac{3}{2} \cos^2 \theta - \frac{1}{2} \right)$      $\begin{matrix} +1-1/2 & 2/5 & 3/5 & 5/2 & 3/2 \\ 0+1/2 & 3/5-2/5 & -1/2-1/2 \end{matrix}$

$Y_2^1 = -\sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \theta \cos \theta e^{i\phi}$      $\begin{matrix} 0-1/2 & 3/5 & 2/5 & 5/2 & 3/2 \\ -1+1/2 & 2/5-3/5 & -3/2-3/2 \end{matrix}$

$Y_2^2 = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{15}{2\pi}} \sin^2 \theta e^{2i\phi}$      $\begin{matrix} +3/2-1 & 1/10 & 2/5 & 1/5 \\ +1/2 & 0 & 3/5 & 1/15-1/5 \\ +1/2+1 & 3/5-2/5 & +1/2+1/2+1/2 \end{matrix}$

$Y_\ell^m = (-1)^m Y_\ell^{m*}$      $d_{m,0}^\ell = \sqrt{\frac{4\pi}{2\ell+1}} Y_\ell^m e^{-im\phi}$      $(j_1 j_2 m_1 m_2 | j_1 j_2 J M) = (-1)^{j_1-j_2-m_1} (j_2 j_1 m_2 m_1 | j_2 j_1 J M)$

$d_{m',m}^{j'} = (-1)^{m-m'} d_{-m,-m'}^j = d_{-m,-m'}^j$      $d_{0,0}^j = \cos \theta$      $d_{1/2,1/2}^{1/2} = \cos \frac{\theta}{2}$      $d_{1,1}^1 = \frac{1+\cos \theta}{2}$

$2 \times 3/2 \begin{matrix} 7/2 & 7/2 & 5/2 \\ +5/2 & 5/2+5/2 \\ +2+3/2 & 1 \end{matrix}$      $d_{1/2,-1/2}^{1/2} = -\sin \frac{\theta}{2}$      $d_{1,0}^1 = \frac{\sin \theta}{\sqrt{2}}$

$2 \times 2 \begin{matrix} 4 & 4 & 3 \\ +3 & 3+3 \\ +2+2 & 1 \end{matrix}$      $d_{1,-1}^1 = \frac{1-\cos \theta}{2}$

$d_{3/2,3/2}^{3/2} = \frac{1+\cos \theta}{2} \cos \frac{\theta}{2}$      $d_{2,2}^2 = \left( \frac{1+\cos \theta}{2} \right)^2$

$d_{3/2,1/2}^{3/2} = -\sqrt{3} \frac{1+\cos \theta}{2} \sin \frac{\theta}{2}$      $d_{2,1}^2 = -\frac{1+\cos \theta}{2} \sin \theta$

$d_{3/2,-1/2}^{3/2} = \sqrt{3} \frac{1-\cos \theta}{2} \cos \frac{\theta}{2}$      $d_{2,0}^2 = \frac{\sqrt{6}}{4} \sin^2 \theta$

$d_{3/2,-3/2}^{3/2} = -\frac{1-\cos \theta}{2} \sin \frac{\theta}{2}$      $d_{2,-1}^2 = \frac{1+\cos \theta}{2} (2 \cos \theta - 1)$