1 Misure, valori medi, probabilità, proiettore, evoluzione temporale, rappresentazione degli impulsi e principio di indeterminazione

- **Valore medio.**

$$\langle \hat{A} \rangle_\psi = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle \tag{1.1}$$

$$\langle \hat{A} \rangle_\psi = \operatorname{Tr} \rho_\psi \hat{A} \tag{1.2}$$

- **Normalizzazione.** Per base discreta $\{|n\rangle\}$ e per base continua $\{|x\rangle\}$, rispettivamente:

$$\begin{aligned} \langle \psi | \psi \rangle &= \sum_{n=1}^{+\infty} |c_n|^2 = 1 \\ \langle \psi | \psi \rangle &= \int_{\mathbb{R}} |\psi(x)|^2 \, dx = 1 \end{aligned} \tag{1.3}$$

- **Matrice densità.** Per stato generico:

$$\operatorname{Tr} \rho = 1 \qquad \rho^\dagger = \rho \qquad \operatorname{Tr} \rho^2 \leqslant 1 \tag{1.4}$$

per stati puri: $\operatorname{Tr} \rho^2 = 1$.

Se ρ relativa a spazio composto da due sottospazi, la sua ridotta al primo è:

$$\rho^{(1)} = \operatorname{Tr}_2 \rho = \sum_m \langle a_n b_m | \rho | a_j b_m \rangle \tag{1.5}$$

La sua evoluzione temporale è:

$$\rho(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} \rho(0) e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} \tag{1.6}$$

- **Flusso di probabilità.**

$$\mathbf{J} = -\frac{i\hbar}{2m} \big(\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^* \big) \tag{1.7}$$

L'equazione di continuità è:

$$\partial_t |\psi|^2 + \nabla \cdot \mathbf{J} = 0 \tag{1.8}$$

- **Probabilità di misura.** Dato osservabile $\hat{A}$, e $\psi = \sum_i c_i |a_i\rangle$ espresso in base fornita da $\hat{A}$, la probabilità di ottenere la misura a_i su $|\psi\rangle$ è $|c_i|^2$.

Se $\hat{A}$ fornisce base continua, allora:

$$P(a) da = |\langle a | \psi \rangle|^2 \, da \tag{1.9}$$

La probabilità di trovare una particella in $|\psi\rangle$ ad una distanza maggiore di x_0, per esempio, è:

$$P(x \geqslant x_0) = \int_{x_0}^{+\infty} |\psi(x)|^2 \, dx$$

- **Impulso, posizione e distanza media.** Sia $|\psi\rangle$ uno stato; allora:

$$\langle \hat{x} \rangle_\psi = \langle \psi | \hat{x} | \psi \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x \, |\psi(x)|^2 \, dx$$

$$\langle \hat{p} \rangle_\psi = \langle \psi | \hat{p} | \psi \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) \big[-i\hbar \partial_x \psi(x) \big] dx$$

$$\langle \hat{r} \rangle_\psi = \int_{\mathbb{R}^3} \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} \, |\psi(\mathbf{x})|^2 \, d^3x$$

$$\langle \hat{r}^2 \rangle_\psi = \int_{\mathbb{R}^3} \big[x^2 + y^2 + z^2 \big] \, |\psi(\mathbf{x})|^2 \, d^3x$$

dove gli ultimi due sono distanza media dal centro e raggio quadratico medio in 3D.

Osservazione 1.1. Il valore medio di spin è analogo, ma calcolato solo su stati di spin; la parte orbitale sparisce per normalizzazione.

- **Evoluzione temporale.**

$$i\hbar \partial_t \psi(\mathbf{x}, t) = \hat{H} \psi(\mathbf{x}, t) \tag{1.10}$$

- **Trasformate di Fourier.**

$$\widetilde{\psi}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x) e^{-\frac{i}{\hbar} p x} dx \tag{1.11}$$

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \widetilde{\psi}(p) e^{\frac{i}{\hbar} p x} dp \tag{1.12}$$

- **Principio di indeterminazione.** Per operatori $\hat{A}, \hat{B}$ tali che $[\hat{A}, \hat{B}] = i\hat{C}$, su uno stato $|\psi\rangle$ si ha:

$$\Delta_A \Delta_B \geqslant \frac{|\langle \hat{C} \rangle_\psi|}{2} = \frac{|\langle \psi | [\hat{A}, \hat{B}] | \psi \rangle|}{2} \tag{1.13}$$

dove per generico operatore $\hat{O}$:

$$\Delta_O = \sqrt{\langle \hat{O}^2 \rangle - \langle \hat{O} \rangle^2} \tag{1.14}$$

2 Commutatori e rappresentazione di operatori

- **Rappresentazione di coordinate in impulsi e viceversa.**

$$\hat{X} \widetilde{\psi}(p) = i\hbar \partial_p \widetilde{\psi}(p) \tag{2.1}$$

$$\hat{P} \psi(x) = -i\hbar \partial_x \psi(x) \tag{2.2}$$

- **Commutatore posizione-impulso.**

$$[\hat{X}, \hat{P}] = i\hbar \mathbb{1} \tag{2.3}$$

- **Commutatori con momento angolare.**

$$[\hat{J}_a, \hat{J}_b] = i\hbar\varepsilon_{abc}\hat{J}_c \qquad [\hat{X}_a, \hat{J}_b] = i\hbar\varepsilon_{abc}\hat{X}_c$$
$$[\hat{P}_a, \hat{J}_b] = i\hbar\varepsilon_{abc}\hat{P}_c$$

- **Momento angolare in coordinate.** Si usa il fatto che $\hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{x}} \times \hat{\mathbf{p}}$:

$$\hat{\mathbf{L}}\psi(\mathbf{x}) = [-i\hbar\mathbf{x} \times \nabla]\,\psi(\mathbf{x}) \tag{2.4}$$

3 Potenziale centrale e cambiamenti di variabile

- **Coordinate CM e relativa.**

$$\hat{\mathbf{X}} = \frac{m_1\hat{\mathbf{r}}_1 + m_2\hat{\mathbf{r}}_2}{m_1 + m_2} \qquad \hat{\mathbf{x}} = \hat{\mathbf{r}}_1 - \hat{\mathbf{r}}_2$$
$$\hat{\mathbf{P}} = \hat{\mathbf{p}}_1 + \hat{\mathbf{p}}_2 \qquad \hat{\mathbf{p}} = \frac{m_1\hat{\mathbf{p}}_1 - m_2\hat{\mathbf{p}}_2}{m_1 + m_2} \tag{3.1}$$

Soddisfano $[\hat{X}_i, \hat{P}_j] = i\hbar\delta_{ij}$, $[\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\delta_{ij}$ e gli altri commutatori sono nulli.

Tornano utili la massa totale $M = m_1 + m_2$ e la massa ridotta $\mu = m_1 m_2/(m_1 + m_2)$.

- **Alcuni cambiamenti di variabile.**

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}_1^2}{2m_1} + \frac{\hat{\mathbf{p}}_2^2}{2m_2} + U(|\hat{\mathbf{r}}_1 - \hat{\mathbf{r}}_2|)$$
$$\to \hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2M} + \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2\mu} + U(\hat{\mathbf{x}})$$

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}_1^2 + \hat{\mathbf{p}}_2^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2(\hat{\mathbf{r}}_1^2 + \hat{\mathbf{r}}_2)^2 + \frac{1}{4}m\kappa^2(\hat{\mathbf{r}}_1 - \hat{\mathbf{r}}_2)^2$$
$$\to \hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2M} + \frac{1}{2}M\omega^2\hat{\mathbf{R}}^2 + \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2\mu} + \frac{1}{2}\mu(\omega^2 + \kappa^2)\hat{\mathbf{r}}^2$$

Nell'ultimo, le masse delle due particelle sono uguali, quindi $M = 2m$ e $\mu = m/2$.

4 Oscillatore armonico

- **Hamiltoniano e grandezze caratteristiche.**

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{X}^2 \tag{4.1}$$

Si definiscono variabili riscalate $\hat{p} = \hat{P}/p_\omega$ e $\hat{x} = \hat{X}/\ell_\omega$, dove $\ell_\omega = \sqrt{\hbar/m\omega}$ e $p_\omega = m\omega\ell_\omega$. Con queste:

$$\hat{H} = \frac{\hbar\omega}{2}\left[\hat{p}^2 + \hat{x}^2\right] \tag{4.2}$$

- **Operatori di distruzione e creazione.** Tramite grandezze riscalate, sono definiti, rispettivamente, da:

$$\hat{a} = \frac{\hat{x} + i\hat{p}}{\sqrt{2}} \qquad \hat{a}^\dagger = \frac{\hat{x} - i\hat{p}}{\sqrt{2}} \tag{4.3}$$

Soddisfano $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1$ e

$$\hat{H} = \frac{\hbar\omega}{2}\left[\hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a}\right] \tag{4.4}$$

- **Operatore numero.** Dato da $\hat{N} = \hat{a}^\dagger\hat{a}$ e soddisfa

$$[\hat{N}, \hat{a}] = -\hat{a} \qquad [\hat{N}, \hat{a}^\dagger] = \hat{a}^\dagger \tag{4.5}$$

Si ha

$$\hat{H} = \hbar\omega(\hat{N} + 1/2) \tag{4.6}$$

Gli autovalori di $\hat{N}$ permettono di trovare autovalori di $\hat{H}$ e caratterizzano le autoenergie perché $n \geqslant 0, n \in \mathbb{N}$:

$$E_n = \hbar\omega(n + 1/2) \tag{4.7}$$

- **Funzioni d'onda dei primi due livelli.**

$$\varphi_0(\omega, x) = \frac{1}{\pi^{1/4}\sqrt{\ell_\omega}}e^{-x^2/(2\ell_\omega^2)}$$
$$\varphi_1(\omega, x) = \frac{\sqrt{2}}{\pi^{1/4}\sqrt{\ell_\omega}}\frac{x}{\ell_\omega}e^{-x^2/(2\ell_\omega^2)} \tag{4.8}$$

La **parità** è $(-1)^n$.

- **Oscillatore armonico in 2D e 3D.** Le funzioni d'onda si ottengono per prodotto lungo le varie dimensioni. Le energie si sommano lungo le varie direzioni:

$$E_N^{(2D)} = \hbar\omega(n_x + n_y + 1) = \hbar\omega(N + 1)$$
$$E_N^{(3D)} = \hbar\omega(n_x + n_y + n_z + 3/2) = \hbar\omega(N + 3/2)$$

I livelli energetici in 2D hanno degenerazione $N+1$; in 3D hanno degenerazione $(N+1)(N+2)/2$.

- **Oscillatore in coordinate sferiche.** Ottenuto perché l'Hamiltoniano commuta con il momento angolare totale.

Le energie si riscrivono per $N = 2n_r + \ell$:

$$E_{n_r,\ell} = \hbar\omega(2n_r + \ell + 3/2) \tag{4.9}$$

La funzione d'onda si scrive come $\psi(r, \theta, \varphi) = R_{n_r,\ell}(r)Y_{\ell,m}(\theta, \varphi)$, con $Y_{\ell,m}(\theta, \varphi)$ sono le armoniche sferiche.

La **parità** di ciascun livello è legata alle armoniche sferiche ed è $(-1)^\ell$.

5 Particella in buca di potenziale infinita

- **Energia.** Si ha

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2ma^2},\ k_n = \frac{n\pi}{a} \tag{5.1}$$

con $n > 0, n \in \mathbb{N}$.

- **Funzioni d'onda.**

$$\psi_n(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) & , n \text{ pari} \\ \\ \sqrt{\frac{2}{a}} \cos\left(\frac{n\pi}{a}x\right) & , n \text{ dispari} \end{cases} \tag{5.2}$$

per $|x| \leqslant a/2$ e 0 fuori.

6 Atomo di idrogeno

7 Spin e composizione di momenti angolari

8 Teoria delle perturbazioni

9 Operatori parità e time-reversal

10 Scattering

11 Regole di selezione

12 Integrali utili

$$\int_0^{r_*} re^{-\alpha r^2}\,dr = \frac{1}{2\alpha}\left(1-e^{-\alpha r_*^2}\right)$$

$$\int_0^{+\infty} r^n e^{-\alpha r}\,dr = \frac{n!}{\alpha^{n+1}}$$

$$\int_0^{+\infty} r^2 e^{-\alpha r^2}\,dr = \frac{\sqrt{\pi}}{4}\alpha^{-3/2}$$

$$\int_0^{+\infty} re^{-\alpha r}\sin(\beta r)\,dr = \frac{2\alpha\beta}{(\alpha^2+\beta^2)^2},\ \Re\{\alpha\}>0$$

$$\int_0^{+\infty} \sin(qr)e^{-r/R}\,dr = \frac{qR^2}{1+q^2R^2}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ay^2+by}\,dy = \sqrt{\frac{\pi}{a}}e^{b^2/4a}$$

$$\int_0^{\pi} \sin\theta\cos^2\theta\,d\theta = \frac{2}{3}$$

13 Sviluppi in serie

$$\frac{1}{1-x} = \sum_{n=0}^{\infty} x^n$$

$$e^x = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^n}{n!}$$

$$\sin x = \sum_{n=0}^{\infty}(-1)^n\frac{x^{2n+1}}{(2n+1)!} = x - \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!} - \dots$$

$$\cos x = \sum_{n=0}^{\infty}(-1)^n\frac{x^{2n}}{(2n)!} = 1 - \frac{x^2}{2!} + \frac{x^4}{4!} - \cdots$$

$$\sinh x = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{x^{2n+1}}{(2n+1)!} = x + \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!} + \cdots$$

$$\cosh x = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{x^{2n}}{(2n)!} = 1 + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^4}{4!} + \cdots$$

$$\ln(1+x) = \sum_{n=1}^{\infty}(-1)^{n-1}\frac{x^n}{n} = x - \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{3} - \cdots$$

$$\arctan x = \sum_{n=0}^{\infty}(-1)^n\frac{x^{2n+1}}{2n+1} = x - \frac{x^3}{3} + \frac{x^5}{5} - \cdots$$

$$(1+x)^\alpha = 1 + \alpha x + \frac{\alpha(\alpha-1)}{2!}x^2 + \frac{\alpha(\alpha-1)(\alpha-2)}{3!}x^3 + \cdots$$

14 Trucchi utili

- **Funzione d'onda negli impulsi.**

  Quando l'Hamiltoniano è speculare in impulso e posizione, è possibile ottenere le funzioni d'onda nello spazio degli impulsi definendo dei parametri in modo che l'impulso assuma stessa forma delle posizioni (*stando attenti a ridefinire tutti i parametri nella funzione d'onda, di modo che eventuali funzioni degli impulsi risultino adimensionali*).

  Esempio 14.1.
  Per oscillatore armonico 2D con $\hat{H} = \hat{p}^2/2m + m\omega^2\hat{x}^2/2$, la funzione d'onda nelle posizioni dello stato fondamentale è $\pi^{-1/2}\gamma^{-1}e^{-(x^2+y^2)/2\gamma^2}$, con γ^2 lunghezza caratteristica del sistema; nello spazio degli impulsi, questa diventa $\pi^{-1/2}\gamma'^{-1}e^{-(p_x^2+p_y^2)/2\gamma'^2}$, dove γ' è l'impulso caratteristico del sistema, dato da $\hbar/\gamma$.

- **Soluzione esatta a Hamiltoniano con perturbazione.**

  Quando viene chiesto un calcolo esatto, invece che approssimazione perturbativa, probabilmente c'è la possibilità di riarrangiare l'Hamiltoniano e di ricondurlo ad uno di una forma analoga a quello imperturbato.

- **Operatore prodotto scalare tra due spin.**

  Nello studio di un Hamiltoniano di spin $\hat{H}_s = \kappa\hat{\mathbf{s}}_1\cdot\hat{\mathbf{s}}_2$, torna utile la relazione

  $$\hat{\mathbf{S}}_1\cdot\hat{\mathbf{S}}_2 = \frac{\hat{S}^2-\hat{S}_1^2-\hat{S}_2^2}{2} \tag{14.1}$$

  dove $\hat{\mathbf{S}} = \hat{\mathbf{S}}_1 + \hat{\mathbf{S}}_2$.

- **Quantità conservate.**

  Le quantità di cui verificare la commutazione con l'Hamiltoniano sono: $\hat{p}, \hat{L}, \hat{J}, \hat{\mathcal{P}}, \hat{T}$. In generale, sono sufficienti le prime tre (se non le prime due nel caso in cui non vi sia un termine di spin nell'Hamiltoniano).

- **Calcolo elementi di matrice.** Ricordare che è possibile utilizzare regole di selezione o espressioni dell'operatore (tipo per la posizione usare operatori di salita e discesa nell'oscillatore armonico), oppure si può passare al calcolo dell'integrale, come nel caso della trattazione perturbativa del potenziale di Coulomb.

15 Proprietà del commutatore

16 Polinomi di Hermite, Laguerre e Lagrange e armoniche sferiche

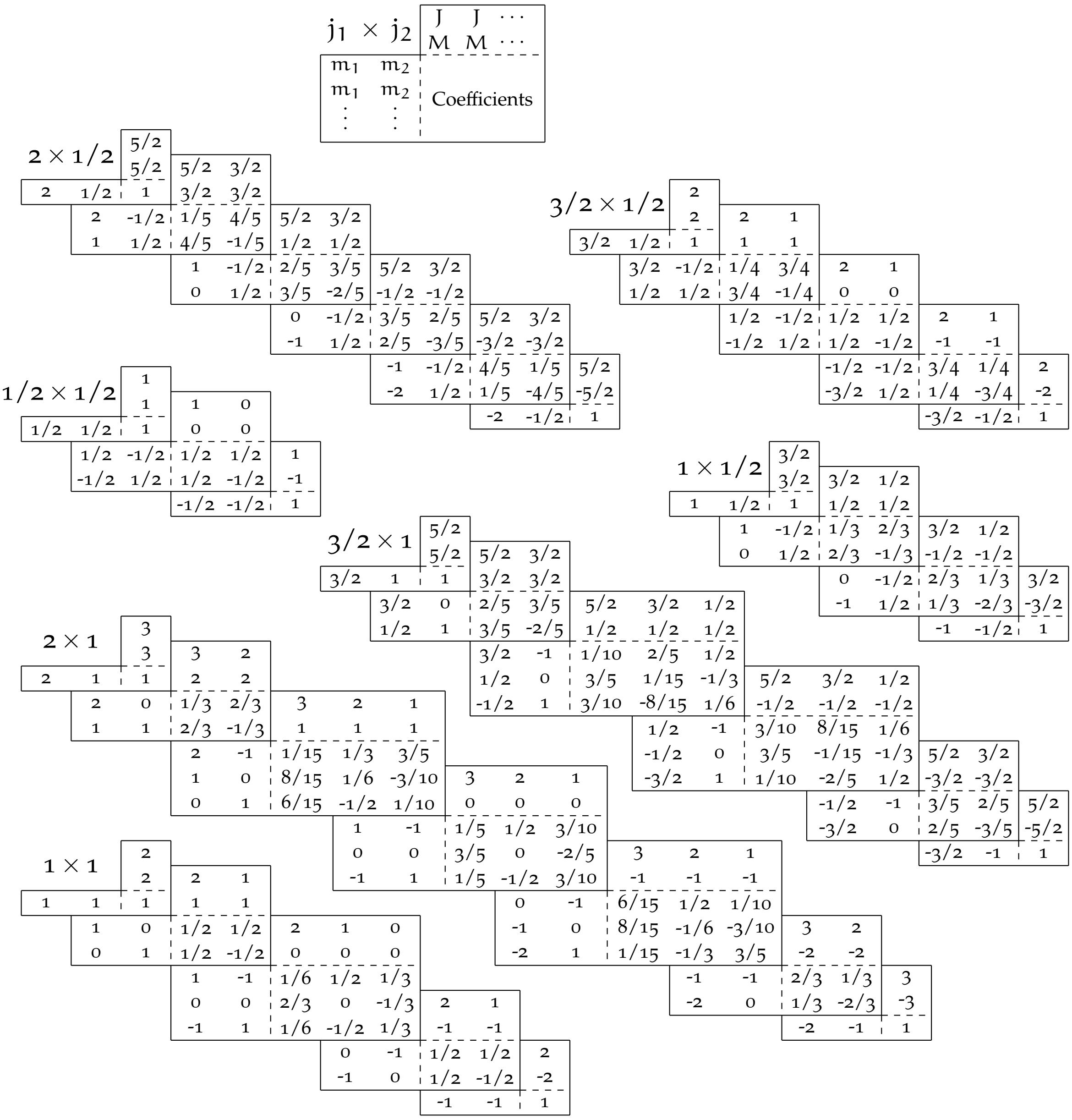

Figura 1: Clebsch-Gordan coefficients. A square root is understood on each coefficient, that is, $-1/3$ means $-\sqrt{1/3}$.