

# Note di Meccanica Quantistica

A cura di Alessandro Varsi

26 dicembre 2023

Alessandro Varsi  
varsialessandro@gmail.com  
<https://github.com/alevarsi>

Le seguenti note sono in fase di sviluppo. In particolare:

- Il capitolo sulla Somma dei Momenti Angolari è in fase di sviluppo.
- Il capitolo sulla Struttura Fine e Iperfine dell'atomo di idrogeno è in fase di sviluppo. Manca il calcolo esplicito degli effetti dei termini aggiuntivi sullo spettro atomico.
- Alla fine ci sono delle appendici che richiamano concetti non propri di un corso di Meccanica Quantistica, che sono nondimeno indispensabili.

#### Commenti sulla notazione

- I vettori verranno indicati con le lettere in grassetto, cioè:  $\vec{A} \equiv \mathbf{A}$ .
- Le formule racchiuse in un box rosso sono generalmente quelle che, a mio avviso, dovrebbero essere inserite in un ipotetico formulario da portare all'esame scritto.

Per favore, contattatemi alla mail [VARSALESSANDRO@GMAIL.COM](mailto:VARSALESSANDRO@GMAIL.COM) per suggerire consigli e/o segnalare refusi.

# Indice

<b>1</b>	<b>Somma di momenti angolari (in via di aggiornamento)</b>	<b>3</b>
1.1	Introduzione . . . . .	3
1.2	Somma di 2 momenti angolari: metodo generale . . . . .	4
1.2.1	Spazio degli stati . . . . .	4
1.2.2	Cambio di base . . . . .	5
1.3	Somma di due momenti di spin $1/2$ di 2 particelle . . . . .	6
<b>2</b>	<b>Teoria delle perturbazioni indipendenti dal tempo</b>	<b>7</b>
2.1	Introduzione del problema . . . . .	7
2.2	Metodo generale . . . . .	8
2.3	Perturbazione sugli stati non degeneri . . . . .	8
2.4	Perturbazione sugli stati degeneri . . . . .	11
<b>3</b>	<b>Applicazioni della teoria delle perturbazioni indipendenti dal tempo</b>	<b>13</b>
3.1	Effetto Stark per l'atomo di idrogeno . . . . .	13
3.1.1	Effetto Stark sullo stato fondamentale $n = 1$ . . . . .	13
3.1.2	Effetto stark sul primo stato eccitato $n = 2$ . . . . .	15
3.2	Effetti delle dimensioni finite del nucleo su un atomo idrogenoide . . . . .	17
3.2.1	Identificazione dell'Hamiltoniana . . . . .	17
3.2.2	Calcolo della correzione al primo ordine . . . . .	18
<b>4</b>	<b>Struttura fine e iperfine dell'atomo di idrogeno (in via di aggiornamento)</b>	<b>19</b>
4.1	LA STRUTTURA FINE . . . . .	19
4.1.1	Effetti relativistici: il termine cinetico . . . . .	19
4.1.2	Spin dell'elettrone: il termine spin-orbita . . . . .	20
4.1.3	Termine di Darwin . . . . .	21
4.2	LA STRUTTURA IPERFINE . . . . .	22
4.2.1	Origine fisica . . . . .	22
4.2.2	Termine di interazione con campo magnetico . . . . .	22
4.2.3	Termine di interazione dipolo-dipolo . . . . .	22
4.2.4	Termine di contatto di Fermi . . . . .	22
<b>A</b>	<b>Elettromagnetismo</b>	<b>24</b>
A.1	Interazione tra dipolo magnetico e campo magnetico . . . . .	24
A.2	Interazione tra dipolo elettrico e campo elettrico . . . . .	25
A.3	Interazione tra carica e campo elettrico uniforme . . . . .	25
<b>B</b>	<b>Matematica</b>	<b>26</b>
B.1	Il laplaciano di $1/r$ . . . . .	26

# Capitolo 1

## Somma di momenti angolari (in via di aggiornamento)

### 1.1 Introduzione

In questa sezione ci occupiamo di capire come calcolare il momento angolare totale di una particella con momento angolare orbitale e spin oppure di un sistema di particelle ognuna con il proprio momento angolare. Cominciamo con il richiamare cosa succede in meccanica classica.

#### MECCANICA CLASSICA

Consideriamo un sistema di  $N$  particelle classiche. Il momento angolare totale del sistema rispetto ad un punto fisso  $O$  è la somma vettoriale dei singoli momenti delle particelle rispetto ad  $O$ :

$$\mathbf{L} = \sum_n^N \mathbf{L}_n = \sum_n^N \mathbf{r}_n \wedge \mathbf{p}_n$$

La derivata rispetto al tempo di  $\mathbf{L}$  è il momento totale delle forze esterne rispetto ad  $O$ , per cui se il **sistema isolato** allora  **$\mathbf{L}$  si conserva**. La cosa importante da notare è che **non si conservano i momenti angolari singoli delle particelle, ma solo quello totale**.

#### MECCANICA QUANTISTICA

In meccanica quantistica le particelle possono avere sia momento angolare orbitale che momento angolare di spin, quindi quello totale è

$$\hat{\mathbf{J}} = \sum_n \hat{\mathbf{L}}_n + \sum_n \hat{\mathbf{S}}_n$$

Dove i momenti angolari hanno le seguenti **regole di commutazione**:

- $[\hat{L}_{n_i}, \hat{S}_{n'_j}] = 0$
- $[\hat{S}_{n_i}, \hat{S}_{n'_j}] = i\hbar\delta_{nn'}\varepsilon_{ijk}\hat{S}_{n_k}$
- $[\hat{L}_{n_i}, \hat{L}_{n'_j}] = i\hbar\delta_{nn'}\varepsilon_{ijk}\hat{L}_{n_k}$

Da cui segue immediatamente che

$$[\hat{J}_i, \hat{J}_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} \hat{J}_k \implies \hat{\mathbf{J}} \text{ è un momento angolare!}$$

Affrontiamo il caso in cui ci sono due momenti angolari da sommare.

## 1.2 Somma di 2 momenti angolari: metodo generale

Questo caso si adatta in realtà a due contesti diversi:

1. 1 particella con spin e momento angolare orbitale:  $\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{L}} + \hat{\mathbf{S}}$
2. 2 particelle senza spin:  $\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{L}}_1 + \hat{\mathbf{L}}_2$

In generale ci occupiamo di effettuare la seguente operazione:

$$\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{J}}_1 + \hat{\mathbf{J}}_2$$

### 1.2.1 Spazio degli stati

Nello spazio della prima particella  $\mathcal{H}_1$  il vettore di stato è indicato dal ket  $|k_1, j_1, m_1\rangle$ , dove  $k_1$  rappresenta tutti i numeri quantici del caso tranne il momento angolare ( $j_1$ ) e lo spin ( $m_1$ ). Inoltre, richiamiamo autovalori e autovettori di alcuni operatori importanti:

$$\begin{cases} \hat{\mathbf{J}}_1^2 |k_1, j_1, m_1\rangle = j_1(j_1 + 1)\hbar^2 |k_1, j_1, m_1\rangle \\ \hat{J}_{1z} |k_1, j_1, m_1\rangle = m_1\hbar |k_1, j_1, m_1\rangle \\ \hat{J}_{1\pm} |k_1, j_1, m_1\rangle = \hbar\sqrt{j_1(j_1 + 1) - m_1(m_1 \pm 1)} |k_1, j_1, m_1 \pm 1\rangle \end{cases} \quad (1.2.1)$$

Nello spazio della seconda particella  $\mathcal{H}_2$  vale lo stesso per il ket  $|k_2, j_2, m_2\rangle$ :

$$\begin{cases} \hat{\mathbf{J}}_2^2 |k_2, j_2, m_2\rangle = j_2(j_2 + 1)\hbar^2 |k_2, j_2, m_2\rangle \\ \hat{J}_{2z} |k_2, j_2, m_2\rangle = m_2\hbar |k_2, j_2, m_2\rangle \\ \hat{J}_{2\pm} |k_2, j_2, m_2\rangle = \hbar\sqrt{j_2(j_2 + 1) - m_2(m_2 \pm 1)} |k_2, j_2, m_2 \pm 1\rangle \end{cases} \quad (1.2.2)$$

D'ora in poi verranno omessi  $k_1$  e  $k_2$  dato che dobbiamo occuparci solo dei momenti angolari. Definisco lo spazio che descrive le due particelle come prodotto tensoriale dei due spazi:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$$

La cui base sarà

$$|j_1, j_2, m_1, m_2\rangle = |j_1, m_1\rangle \otimes |j_2, m_2\rangle$$

Ogni spazio ha dimensione  $2j + 1$  quindi

$$\dim \mathcal{H} = \dim \mathcal{H}_1 \dim \mathcal{H}_2 = (2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$$

### 1.2.2 Cambio di base

Dato che  $\hat{\mathbf{J}}$  soddisfa le relazioni di commutazione di un momento angolare, allora è un momento angolare. In quanto tale, è possibile **diagonalizzare simultaneamente**  $\hat{\mathbf{J}}^2$  e  $\hat{J}_z$ , da cui segue che in  $\mathcal{H}$  ci sarà una base  $|j, m\rangle$  tale che:

$$\begin{cases} \hat{\mathbf{J}}^2 |j, m\rangle = j(j+1)\hbar^2 |j, m\rangle \\ \hat{J}_z |j, m\rangle = m\hbar |j, m\rangle \end{cases}$$

Ora ci occupiamo di trovare il legame tra  $|j, m\rangle$  e  $|j_1, m_1\rangle, |j_2, m_2\rangle$ . Ci sono **2 BASI POSSIBILI**

1. Usando (1.2.1) e (1.2.2) è possibile trovare

$$\begin{aligned} &\text{AUTOSTATI SIMULTANEI di } \hat{\mathbf{J}}_1^2, \hat{J}_{1z}, \hat{\mathbf{J}}_2^2, \hat{J}_{2z} \\ &\implies |j_1, j_2, m_1, m_2\rangle \text{ è sicuramente una base} \end{aligned}$$

2. E' anche possibile **COINVOLGERE**  $\hat{\mathbf{J}}^2$  e  $\hat{J}_z$ . Per farlo vediamo le relazioni di commutazione importanti. Innanzitutto  $\hat{\mathbf{J}}^2$  può essere scritto così:

$$\hat{\mathbf{J}}^2 = \hat{\mathbf{J}}_1^2 + \hat{\mathbf{J}}_2^2 + 2\hat{\mathbf{J}}_1 \cdot \hat{\mathbf{J}}_2 \quad (1.2.3)$$

$$= \hat{\mathbf{J}}_1^2 + \hat{\mathbf{J}}_2^2 + 2\hat{J}_{1z}\hat{J}_{2z} + \hat{J}_{1+}\hat{J}_{2-} + \hat{J}_{1-}\hat{J}_{2+} \quad (1.2.4)$$

Dato che  $\hat{\mathbf{J}}_1$  e  $\hat{\mathbf{J}}_2$  commutano entrambi con  $\hat{\mathbf{J}}_1^2$  e  $\hat{\mathbf{J}}_2^2$ , allora anche  $\hat{\mathbf{J}}$  lo fa. In particolare,  $\hat{\mathbf{J}}^2$  e  $\hat{J}_z = \hat{J}_{1z} + \hat{J}_{2z}$  commutano con  $\hat{\mathbf{J}}_1^2$  e  $\hat{\mathbf{J}}_2^2$ :

$$[\hat{\mathbf{J}}, \hat{\mathbf{J}}_1^2] = [\hat{\mathbf{J}}, \hat{\mathbf{J}}_2^2] = 0$$

$$[\hat{J}_z, \hat{\mathbf{J}}_1^2] = [\hat{J}_z, \hat{\mathbf{J}}_2^2] = 0$$

Inoltre, anche  $\hat{J}_{1z}$  e  $\hat{J}_{2z}$  commutano con  $\hat{J}_z$

$$[\hat{J}_{1z}, \hat{J}_z] = [\hat{J}_{2z}, \hat{J}_z] = 0$$

Ma  $\hat{J}_{iz}$  **non commutano con**  $\hat{\mathbf{J}}^2$ !, infatti per  $\hat{J}_{1z}$ :

$$\begin{aligned} [\hat{\mathbf{J}}^2, \hat{J}_{1z}] &= [\hat{\mathbf{J}}_1^2 + \hat{\mathbf{J}}_2^2 + 2\hat{\mathbf{J}}_1 \cdot \hat{\mathbf{J}}_2, \hat{J}_{1z}] = \\ &= 2[\hat{\mathbf{J}}_1 \cdot \hat{\mathbf{J}}_2, \hat{J}_{1z}] = [\hat{J}_{1x}\hat{J}_{2x} + \hat{J}_{1y}\hat{J}_{2y} + \hat{J}_{1z}\hat{J}_{2z}] = \\ &= 2i\hbar(-\hat{J}_{1y}\hat{J}_{2x} + \hat{J}_{1x}\hat{J}_{2y}) \neq 0 \end{aligned}$$

Allora possiamo usare questo **C.S.C.O.**  $\{\hat{\mathbf{J}}_1^2, \hat{\mathbf{J}}_2^2, \hat{\mathbf{J}}^2, \hat{J}_z\}$

Ora, finalmente, cerchiamo il legame tra le basi 1) e 2).

$$\begin{aligned} |j_1, j_2, j, m\rangle &= \mathbb{1} |j_1, j_2, j, m\rangle = \\ &= \sum_{m_1, m_2} |j_1, j_2, m_1, m_2\rangle \langle j_1, j_2, m_1, m_2 | j_1, j_2, j, m \rangle \end{aligned}$$

I termini

$$C_{CG} = \langle j_1, j_2, m_1, m_2 | j_1, j_2, j, m \rangle$$

Sono detti **COEFFICIENTI DI CLEBSH-GORDAN**. Il cambio di base completo è quindi:

$$|j_1, j_2, j, m\rangle = \sum_{m_1, m_2} C_{CG} |j_1, j_2, m_1, m_2\rangle$$

Alcune proprietà dei coefficienti di Clebsh-Gordan

1. I coefficienti sono 0 a meno che  $m = m_1 + m_2$

DIM.

$$\hat{J}_z = \hat{J}_{1z} + \hat{J}_{2z} \implies \hat{J}_z - \hat{J}_{1z} - \hat{J}_{2z} = 0$$

$$\langle j_1 j_2 m_1 m_2 | \hat{J}_z - \hat{J}_{1z} - \hat{J}_{2z} | j_1 j_2 j m \rangle = 0$$

Applicando  $\hat{J}_z$  a destra e gli altri a sinistra si ottiene

$$(m - m_1 - m_2) \langle j_1 j_2 m_1 m_2 | j_1 j_2 j m \rangle = 0$$

Quindi, se  $m \neq m_1 + m_2 \Rightarrow$  coefficiente = 0

2. I coefficienti sono 0 a meno che

$$|j_1 - j_2| \leq j \leq j_1 + j_2$$

Questa è spesso nota come **regola di selezione triangolare** in quanto significa che il coefficiente di Clebsh-Gordan può essere diverso da zero solo se è possibile disegnare un triangolo con lati di lunghezza  $j_1, j_2$  e  $j$ . Mostriamo la dimostrazione di questo fatto in un caso concreto, che si propone anche come sempio di somma di momenti angolari

### 1.3 Somma di due momenti di spin 1/2 di 2 particelle

In questo caso  $j_1 = j_2 = 1/2$  e sono fissati, non cambieranno mai, per cui per alleggerire la notazione facciamo il seguente cambio:

$$|j_1 j_2 j m\rangle \mapsto |j m\rangle$$

$$|j_1 j_2 m_1 m_2\rangle \mapsto |\pm \pm\rangle$$

Ricordiamo che  $m = m_1 + m_2$ . Partiamo da  $m_1, m_2$  più grandi possibili  $\Rightarrow m_1 = j_1, m_2 = j_2 \Rightarrow m = j_1 + j_2 = 1$ . Quindi, dato che  $\hat{\mathbf{J}}$  è un momento angolare, vale sicuramente che  $-j \leq m \leq j$ , ma dato che  $m$  è il **massimo** allora **deve esserci**  $j = 1$

$$\exists |j m\rangle = |1 1\rangle = |++\rangle \quad (1.3.1)$$

Per trovare gli altri si applica l'operatore di abbassamento per il momento angolare seguendo la seguente procedura:

$$\hat{J}_- |1 1\rangle = \hbar \sqrt{1(1+1) - 1(1-1)} |1 0\rangle = \sqrt{2}\hbar |1 0\rangle$$

Ma ora utilizziamo  $\hat{J}_- = \hat{J}_{1-} + \hat{J}_{2-}$ . Dall'equazione sopra

$$|1 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}\hbar} \hat{J}_- |++\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}\hbar} (\hat{J}_{1-} + \hat{J}_{2-}) |++\rangle =$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}\hbar} (\hbar |-+\rangle + \hbar |+-\rangle)$$

Quindi

$$|1 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [| - + \rangle + | + - \rangle] \quad (1.3.2)$$

## Capitolo 2

# Teoria delle perturbazioni indipendenti dal tempo

Come si è visto fino a questo punto, l'applicazione della meccanica quantistica allo studio dei sistemi conservativi si basa sulla diagonalizzazione dell'operatore Hamiltoniana. I casi più semplici che si possono trattare sono l'oscillatore armonico e l'atomo idrogenoide nella sua prima approssimazione, ma nel tentativo di descrivere sistemi leggermente più complessi ci si accorge che diventa impossibile trovare una soluzione analitica dell'equazione di Schrödinger.

A questo punto si può procedere utilizzando *metodi numerici* con l'aiuto di un computer, **oppure** è possibile, in alcuni casi, trovare delle soluzioni analitiche *approssimate* dell'equazione agli autovalori. La cosiddetta **teoria delle perturbazioni** si divide in due rami:

- a) Teoria delle perturbazioni indipendenti dal tempo
- b) Teoria delle perturbazioni dipendenti dal tempo

In questo capitolo ci occuperemo di perturbazioni indipendenti dal tempo.

### 2.1 Introduzione del problema

Il problema è il seguente: trovare le soluzioni di

$$\hat{H} |\psi_n\rangle = E_n |\psi_n\rangle \quad (2.1.1)$$

quando non siamo in grado di diagonalizzare  $\hat{H}$ .

Il metodo perturbativo è applicabile sotto alcune ipotesi:

1. L'Hamiltoniana del sistema è scrivibile nella seguente forma:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_P$$

dove noi siamo in grado di diagonalizzare  $\hat{H}_0$  e  $\hat{H}_P$  rappresenta la *perturbazione* stazionaria.

2. Il termine perturbativo deve essere **piccolo** rispetto ad  $\hat{H}_0$ , cioè deve essere possibile scriverlo in questo modo:

$$\hat{H}_P = \lambda \hat{H}_1 \quad \text{con } \lambda \ll 1$$

Dove  $\hat{H}_1$  sarà un generico operatore, il cui peso è dato appunto da  $\lambda$ .



3. Il sistema deve trovarsi in un equilibrio stabile, nel senso che se si spegne la perturbazione si torna alla situazione in cui c'è solo  $\hat{H}_0$ . Questo vuol dire che cerchiamo le soluzioni scrivibili come **serie di potenze in  $\lambda$** , in modo tale che per  $\lambda \rightarrow 0$  si torni alla soluzione imperturbata. Si vuole anche che la serie risulti **rapidamente convergente**, cioè che bastino pochi termini per individuarne il comportamento.

## 2.2 Metodo generale

L'ipotesi è quella di conoscere la soluzione del problema per  $\hat{H}_0$ , cioè

$$\hat{H}_0 |\varphi_n\rangle = E_n^{(0)} |\varphi_n\rangle$$

Questo vuol dire che  $|\varphi_n\rangle$  formano una base dello spazio di Hilbert e quindi può essere utilizzata per espandere ogni funzione appartenente allo spazio (tra cui la nostra soluzione finale  $|\psi\rangle$ ):

$$|\psi_n\rangle = \sum_k d_{nk} |\varphi_k\rangle$$

Si dice che **il calcolo perturbativo è portato avanti nella rappresentazione degli stati imperturbati**.

Fino a qui è tutto esatto, ma ora entra in gioco l'approssimazione: cerchiamo di espandere i **coefficienti in serie di potenze in  $\lambda$** . Decidiamo di studiare i seguenti due casi separatamente:

- a)  $|\varphi_n\rangle$  non degenerare  $\implies$  ad ogni energia corrisponde un solo stato
- b)  $|\varphi_n^i\rangle$  degenerare  $\implies$  tutti gli stati  $i = 1, 2, \dots$  hanno la medesima energia  $E_n^{(0)}$

## 2.3 Perturbazione sugli stati non degeneri

Comincio a portare fuori dalla somma il termine *n-esimo* nell'equazione (??)

$$|\psi_n\rangle = d_{nn} |\varphi_n\rangle + \sum_{k \neq n} d_{nk} |\varphi_k\rangle$$

e ora raccolgo  $d_{nn} \equiv N(\lambda)$

$$|\psi_n\rangle = N(\lambda) \left[ |\varphi_n\rangle + \sum_{k \neq n} c_{nk} |\varphi_k\rangle \right]$$

ovviamente  $c_{nk} \equiv d_{nk}/d_{nn}$ . Ora  $N(\lambda)$  è diventato un semplice fattore di normalizzazione e verrà trovato in seguito utilizzando l'ortonormalità  $\langle \psi_n | \psi_n \rangle = 1$ .

Ora cominciamo con i passi dell'approssimazione.

1. Se  $\lambda = 0$  deve essere  $\hat{H} = \hat{H}_0$ , cioè **una perturbazione infinitesima deve produrre un effetto infinitesimo**. Questo è causato dall'ipotesi di equilibrio stabile del problema. La traduzione matematica è:

$$\begin{cases} N(0) = 1 \\ c_{nk}(0) = 0 \end{cases}$$

2. Cerchiamo  $c_{nk}(\lambda)$  come **funzioni analitica in  $\lambda$**  (approssimazione), cioè:

$$c_{nk}(\lambda) = c_{nk}^{(0)} + \lambda c_{nk}^{(1)} + \lambda^2 c_{nk}^{(2)} + \dots$$

Ma  $c_{nk}(0) = 0 \implies c_{nk}^{(0)} = 0$ .

3. Allo stesso modo, cerchiamo  $E_n$  in serie di potenze:

$$E_n(\lambda) = E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \dots$$

A questo punto siamo pronti per inserire tutte le funzioni approssimate dentro l'equazione di Schrödinger (2.1.1) per ottenere

$$\begin{aligned} (\hat{H}_0 + \lambda \hat{H}_1) \left[ |\varphi_n\rangle + \lambda \sum_{k \neq n} c_{nk}^1 |\varphi_k\rangle + \lambda^2 \sum_{k \neq n} c_{nk}^2 |\varphi_k\rangle + \dots \right] = \\ = (E_n(0) + \lambda E_n(1) + \lambda^2 E_n(2) + \dots) \left[ |\varphi_n\rangle + \lambda \sum_{k \neq n} c_{nk}^1 |\varphi_k\rangle + \lambda^2 \sum_{k \neq n} c_{nk}^2 |\varphi_k\rangle + \dots \right] \end{aligned} \quad (2.3.1)$$

Viene richiesto che questa equazione sia soddisfatta per  $\lambda$  piccolo ma comunque arbitrario, quindi è necessario eguagliare i coefficienti dei diversi ordini di  $\lambda$ .

**Ordine 0**  $\rightarrow \lambda^0$

$$\hat{H}_0 |\varphi_n\rangle = E_n^{(0)} |\varphi_n\rangle$$

**Ordine 1**  $\rightarrow \lambda^1$

$$\hat{H}_1 |\varphi_n\rangle + \sum_{k \neq n} c_{nk}^{(1)} \hat{H}_0 |\varphi_k\rangle = E_n^{(1)} |\varphi_n\rangle + E_n^{(0)} \sum_{k \neq n} c_{nk}^{(1)} |\varphi_k\rangle$$

da cui

$$E_n^{(1)} |\varphi_n\rangle = \hat{H}_1 |\varphi_n\rangle + \sum_{k \neq n} c_{nk}^{(1)} (E_k^{(0)} - E_n^{(0)}) |\varphi_k\rangle \quad (2.3.2)$$

Dove si rammenta che le incognite sono  $E_n^{(1)}$  e  $c_{nk}^{(1)}$ . Per ricavare l'energia applichiamo  $\langle \varphi_n |$  a entrambi i membri si ottiene

$$E_n^{(1)} = \langle \varphi_n | \hat{H}_1 | \varphi_n \rangle \quad (2.3.3)$$

La **correzione al 1° ordine** è data dal **valore di aspettazione della parte perturbativa dell'hamiltoniana calcolato sullo stato imperturbato**. Quindi

$$E_n(\lambda) = E_n^{(0)} + \langle \varphi_n | \hat{H}_P | \varphi_n \rangle + O(\lambda^2)$$

**Esempio.** Nella rappresentazione delle coordinate:

$$\lambda E_n^{(1)} = \int d^3x \varphi_n^*(\mathbf{x}) \lambda \hat{H}_1 \varphi_n(\mathbf{x}) = \int d^3x \hat{H}_P |\varphi_n(\mathbf{x})|^2$$

Da cui si evince che il termine correttivo dipende da quanto si sovrappongono  $\hat{H}_P(\mathbf{x})$  e la densità di probabilità. **La perturbazione ha un maggiore effetto sui livelli energetici nei punti se si sovrappongono.**

**Esempio.** Se la funzione  $\varphi_n(\mathbf{x})$  ha parità definita e  $\hat{H}_P(\mathbf{x})$  è dispari, allora la correzione al primo ordine dell'energia è nulla.

Per la correzione agli stati applichiamo  $\langle \varphi_m |$  con  $m \neq n$ :

$$0 = \langle \varphi_m | \hat{H}_1 | \varphi_n \rangle + c_{nm}^{(1)} (E_n^{(0)} - E_m^{(0)})$$

$$\boxed{\lambda c_{nk}^{(1)} = \frac{\langle \varphi_k | \lambda \hat{H}_1 | \varphi_n \rangle}{E_k^{(0)} - E_n^{(0)}}} \quad (2.3.4)$$

Di conseguenza, il vettore di stato  $|\psi_n\rangle$  corrispondente allo stato imperturbato  $|\varphi_n\rangle$  è

$$|\psi_n\rangle = N(\lambda) \left[ |\varphi_n\rangle + \lambda \sum_{k \neq n} \frac{\langle \varphi_k | \hat{H}_P | \varphi_n \rangle}{E_k^{(0)} - E_n^{(0)}} |\varphi_k\rangle + O(\lambda^2) \right]$$

La correzione al primo ordine del vettore di stato è una sovrapposizione lineare di tutti gli stati imperturbati: si dice che **la perturbazione mescola gli stati**. Il peso con cui avviene questo mixing è dato da

$$\text{PESO} = \frac{\text{VALORE DELLA PERTURBAZIONE TRA GLI STATI IMPERTURBATI}}{\text{DIFFERENZA TRA I LIVELLI ENERGETICI}}$$

Da qui si evince una cosa importante: **Quanto più il livello "k" è lontano, tanto meno avrà peso in questa miscela**, cioè **contano di più i livelli vicini**. Inoltre, è evidente come mai abbiamo separato i casi di degenerazione da quelli di non degenerazione: la (2.3.4) non avrebbe senso nel caso in cui  $E_n^{(0)} = E_k^{(0)}$ . A questo punto cerchiamo  $N(\lambda)$  utilizzando l'ortonormalità

$$\begin{aligned} \langle \psi_n | \psi_n \rangle = 1 &= |N|^2 \left[ \langle \varphi_n | + \sum_{k \neq n} \lambda (c_{nk}^{(1)})^* \langle \varphi_k | + O(\lambda^2) \right] \left[ |\varphi_n\rangle + \sum_{k' \neq n} \lambda c_{nk'}^{(1)} |\varphi_{k'}\rangle + O(\lambda^2) \right] = \\ &= |N|^2 [1 + 0 + 0 + O(\lambda^2)] \Rightarrow \boxed{N(\lambda) = 1 + O(\lambda^2)} \end{aligned}$$

Finalmente abbiamo trovato la correzione al 1° ordine per il vettore di stato:

$$\boxed{|\psi_n\rangle = |\varphi_n\rangle + \lambda \sum_{k \neq n} \frac{\langle \varphi_k | \hat{H}_P | \varphi_n \rangle}{E_k^{(0)} - E_n^{(0)}} |\varphi_k\rangle + O(\lambda^2)} \quad (2.3.5)$$

Commenti - limiti di validità della teoria delle perturbazioni. Affinché la serie in  $\lambda$  sia rapidamente convergente occorre che il coefficiente di  $\lambda$  sia **piccolo**, cioè che  $\langle |\hat{H}_P| \rangle$  tra gli stati imperturbati sia molto minore di  $\hat{H}_0$  sugli stessi stati. In particolare, dalla (2.3.3) si vuole che

$$E_n^{(1)} = \langle \varphi_n | \hat{H}_P | \varphi_n \rangle \ll \langle \varphi_n | \hat{H}_0 | \varphi_n \rangle$$

e dalla equazione (2.3.5) si nota che la teoria è valida se gli elementi **non diagonali della matrice  $H_P$**  sono **molto minori della differenza tra i livelli energetici imperturbati**.

## Ordine 2 $\rightarrow \lambda^2$

Si procede allo stesso modo. Partendo dalla (2.3.1) eguagliamo i termini in  $\lambda^2$ :

$$\hat{H}_0 \sum_{k \neq n} c_{nk}^{(2)} |\varphi_k\rangle + \hat{H}_1 \sum_{k \neq n} c_{nk}^{(1)} |\varphi_k\rangle = E_n^{(0)} \sum_{k \neq n} c_{nk}^{(2)} |\varphi_k\rangle + E_n^{(1)} \sum_{k \neq n} c_{nk}^{(1)} |\varphi_k\rangle + E_n^{(2)} |\varphi_n\rangle \quad (2.3.6)$$

Per trovare la l'energia applichiamo  $\langle \varphi_n |$  a entrambi i membri

$$E_n^{(2)} = \sum_{k \neq n} c_{nk}^{(1)} \langle \varphi_n | \hat{H}_1 | \varphi_k \rangle = \sum_{k \neq n} \frac{\langle \varphi_k | \hat{H}_1 | \varphi_n \rangle}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} \langle \varphi_n | \hat{H}_1 | \varphi_k \rangle$$

Uno è il complesso coniugato dell'altro, per cui

$$E_n^{(2)} = \sum_{k \neq n} \frac{|\langle \varphi_k | \hat{H}_1 | \varphi_n \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}$$

## COMMENTI

Al 1° ordine le correzioni erano gli elementi diagonali ((2.3.3)). Al 2° ordine entrano in gioco **tutti i livelli**.

1. Come nella (2.3.4) c'è il fattore  $E_n^{(0)} - E_k^{(0)}$ . Quindi, quanto più lo stato  $k$  è lontano energeticamente, tanto meno conta. Questo apre alla possibilità che la somma, che è **estesa a tutti gli stati, anche quelli liberi per ex.**, si possa troncare da un certo punto in poi.
2. Cosa succede allo **stato fondamentale**  $|\varphi_n\rangle$ ?

$$E_n^{(0)} - E_k^{(0)} < 0$$

Quindi, dato che il numeratore è positivo, **le correzioni al secondo ordine sono negative**.

3. Se lo stato  $k$  è "IMPORTANTE", cosa che può succedere perché

- Vicino in energia
- Il fattore  $|\langle \varphi_k | \hat{H}_1 | \varphi_n \rangle|$  è grande

Allora ci sono due casi. Se  $k$  si trova **sopra**  $n$ , le correzioni a  $E_n$  sono **negative**. Se  $k$  si trova **sotto**  $n$ , le correzioni sono **positive**. Si dice che *I livelli tendono a respingersi*. N.B.: bisogna anche considerare le correzioni al primo ordine ovviamente.

Per trovare le correzioni agli stati, cioè  $c_{nk}^{(2)}$ , bisogna applicare  $\langle \varphi_m |$  con  $m \neq n$ .

$$c_{nk}^{(2)} = \dots$$

Fare attenzione al fatto che ora bisogna trovare la normalizzazione  $N(\lambda)$ . Ci era venuto  $N(\lambda) = 1 + O(\lambda^2)$  ma ora siamo all'ordine 2 quindi non si possono trascurare i termini  $O(\lambda^2)$ .

## 2.4 Perturbazione sugli stati degeneri

Ora assumiamo che il livello  $E_n^{(0)}$  di cui vogliamo calcolare le correzioni sia degenerare  $g_n$  volte. In questo caso è necessario un altro indice  $i = 1, 2, \dots, g_n$  per indicare gli stati corrispondenti al livello  $n$  -esimo. Indicheremo ogni stato con

$$|\varphi_n^i\rangle \quad \text{con} \quad \langle \varphi_n^i | \varphi_n^j \rangle = \delta_{nn'} \delta_{ij}$$

**Cosa cambia** rispetto al caso non degenerare? Ora il generico stato corrispondente all'energia  $E_n^{(0)}$  può essere in linea di principio una generica combinazione lineare di tutti gli stati  $|\varphi_n^i\rangle$ . Cerchiamo sempre  $|\psi_n\rangle$  in serie di potenze, ma ora l'espressione si complica:

$$|\psi_n\rangle = N(\lambda) \left[ \sum_{i=1}^{g_n} \alpha_i |\varphi_n^i\rangle + \lambda \sum_{k \neq n} c_{nk}^{(1)} \sum_{i=1}^{g_n} \beta |\varphi_k^i\rangle + \dots \right] \quad (2.4.1)$$

Inserendo questa equazione in quella di Schrodinger (2.1.1) si può procedere a eguagliare i diversi ordini di  $\lambda$  come fatto sopra.

### Ordine 0 $\rightarrow \lambda^0$

Inutile, non fornisce informazioni.

### Ordine 1 $\rightarrow \lambda^1$

$$\hat{H}_0 \sum_{k \neq n} c_{nk}^{(1)} \sum_i \beta |\varphi_k^i\rangle + \hat{H}_1 \sum_i \alpha_i |\varphi_n^i\rangle = E_n^{(0)} \sum_{k \neq n} c_{nk}^{(1)} \sum_i = 1 \beta |\varphi_k^i\rangle + E_n^{(1)} \sum_i \alpha_i |\varphi_n^i\rangle$$

Per trovare le correzioni all'energia si applica, come sopra,  $\langle \varphi_n^j |$ , da cui

$$0 + \sum_i \alpha_i \langle \varphi_n^j | \hat{H}_1 | \varphi_n^i \rangle = 0 + E_n^{(1)} \alpha_j \quad (2.4.2)$$

Ma attenzione,  $\hat{H}_{ji} = \langle \varphi_n^j | \hat{H}_1 | \varphi_n^i \rangle$  rappresenta l'entrata  $ji$  della matrice  $\hat{H}_1$  nel sottospazio degenere (matrice  $g_n \times g_n$ ). In questa ottica, l'equazione (2.4.2) diventa un **EQUAZIONE AGLI AUTOVALORI**:

$$\boxed{\sum_i H_{ji} \alpha_i = E_n^{(1)} \alpha_j}$$

In forma matriciale:

$$\begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} & \cdots & H_{1g_n} \\ H_{21} & H_{22} & \cdots & H_{2g_n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ H_{g_n 1} & H_{g_n 2} & \cdots & H_{g_n g_n} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \vdots \\ \alpha_{g_n} \end{pmatrix} = E_n^{(1)} \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \vdots \\ \alpha_{g_n} \end{pmatrix}$$

E' evidente che

- $E_n^{(1)}$  sono gli **autovalori** (correzioni alle energie)
- $\alpha_i$  sono le componenti degli **autovettori** (correzioni agli stati)

In definitiva, il problema di **trovare le perturbazioni per gli stati degeneri** si riduce a quello di **DIAGONALIZZARE LA PARTE PERTURBATIVA DELL'HAMILTONIANA ALL'INTERNO DELLO SPAZIO DEGENERE**.

NOTA BENE: NON stiamo diagonalizzando  $\hat{H}_1$  in tutto lo spazio.

COMMENTO. Dato che è un'equazione agli autovalori per una matrice  $g_n \times g_n$ , è possibile trovare fino a  $g_n$  valori **diversi** per  $E_n^{(1)}$ . Tutti gli stati degeneri partono da  $E_n^{(0)}$ , energia dovuta ad  $\hat{H}_0$ , ma la **perturbazione può separare le energie degli stati degeneri**.

### Ordine 2 $\rightarrow \lambda^2$

I calcoli per il secondo ordine si fanno complicati quindi non verranno trattati in queste note.

## Capitolo 3

# Applicazioni della teoria delle perturbazioni indipendenti dal tempo

In questo capitolo vengono svolti una serie di esercizi di applicazione della teoria delle perturbazioni. Verrà messo un particolare accento sull'atomo di idrogeno.

### 3.1 Effetto Stark per l'atomo di idrogeno

Consideriamo un atomo di idrogeno posizionato all'interno di un **campo elettrico**  $\mathcal{E}$  parallelo all'asse  $z$ . La carica quindi sente un potenziale elettrico che aggiunge termine all'Hamiltoniana del tipo:

$$\hat{H}_P = -q\vec{\mathcal{E}} \cdot \vec{x} = -q\mathcal{E}z$$

Anche per i campi elettrici più forti che possono essere generati in laboratorio, sarà sempre  $\hat{H}_P \ll \hat{H}_0$ , per cui è ragionevole trattare questo termine come una perturbazione. Scegliendo  $\lambda = -q\mathcal{E}$ :

$$\hat{H} = \hat{H}_0 - q\mathcal{E}z = \hat{H}_0 + \lambda\hat{H}_1 \quad \text{con} \quad \hat{H}_1 = \hat{z}$$

#### 3.1.1 Effetto Stark sullo stato fondamentale $n = 1$

La prima domanda da porsi in questo tipo di esercizi è: **lo stato su cui si vuole calcolare la perturbazione è degenere o no?** In questo caso no, infatti l'unico stato con  $n = 1$  è  $|n\ l\ m\rangle = |1\ 0\ 0\rangle$ .

**Correzione al primo ordine**

$$\begin{aligned} E_{100}^{(1)} &= (-q\mathcal{E}) \langle 1\ 0\ 0 | \hat{z} | 1\ 0\ 0 \rangle = \\ &= -q\mathcal{E} \int d^3r\ z |\varphi_{100}(r)|^2 = 0 \end{aligned}$$

per simmetria, dato che lo stato fondamentale ha parità definita quindi il suo modulo quadro è pari e  $\hat{z}$  è un operatore dispari. **Non c'è correzione al primo ordine**

**Correzione al secondo ordine**

$$E_{100}^{(2)} = q^2\mathcal{E}^2 \sum_{n \neq 1} \sum_{l,m} \frac{|\langle n\ l\ m | \hat{z} | 1\ 0\ 0 \rangle|^2}{E_1^{(0)} - E_n^{(0)}} \quad (3.1.1)$$

NOTA BENE: la somma è estesa a **tutti gli stati**, anche quelli nel continuo (se ci sono).

E' possibile semplificare di molto la somma utilizzando argomenti di simmetria. Notiamo innanzitutto che  $\hat{H}_P$  è simmetrico per rotazioni attorno all'asse  $z$ .

$$[\hat{L}_z, \hat{z}] = 0 \Rightarrow \hat{L}_z(\hat{z}|n' l' m'\rangle) = \hat{z}(\hat{L}_z|n' l' m'\rangle) = m' \hbar (\hat{z}|n' l' m'\rangle)$$

cioè  $\hat{z}|n' l' m'\rangle$  è autostato di  $\hat{L}_z$  con lo stesso  $m$  di  $|n' l' m'\rangle$ . Questo, nel nostro caso, vuol dire che lo stato  $\hat{z}|1 0 0\rangle$  ha momento angolare lungo  $z$  pari a 0, cioè ha  $m = 0$ . Allora grazie all'ortogonalità delle armoniche sferiche, nella (3.1.1) sopravvive solo il termine con  $m = 0$  e la somma diventa estesa solo a  $n \neq 1$  ed  $l$ .

Questo fatto viene generalizzato in una **REGOLA DI SELEZIONE**, secondo la quale

$$\langle n l m | \hat{z} | n' l' m' \rangle \neq 0 \Leftrightarrow m = m' \Leftrightarrow \Delta m = 0$$

Rimane ora da calcolare

$$\sum_{n \neq 1, l} \frac{|\langle n l 0 | \hat{z} | 1 0 0 \rangle|^2}{E_1^{(0)} - E_n^{(0)}}$$

Allora forza e coraggio, si parte.

$$\begin{aligned} \langle n l 0 | \hat{z} | 1 0 0 \rangle &= \int_0^\infty dr r^2 \int d\Omega R_{nl}^*(r) Y_l^{0*}(\theta, \varphi) r \cos \theta R_{10}(r) Y_0^0(\theta, \varphi) = \\ &= \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \int_0^\infty dr r^3 R_{nl}(r) R_{10}(r) \int d\Omega Y_l^{0*}(\theta, \varphi) Y_1^0(\theta, \varphi) \end{aligned}$$

L'integrale sull'angolo solido equivale proprio al prodotto scalare tra due armoniche sferiche

$$\int d\Omega Y_l^{0*}(\theta, \varphi) Y_1^0(\theta, \varphi) = \langle l 0 | 1 0 \rangle = \delta_{l,1}$$

dato che sono ortonormali. Quindi

$$\langle n l m | \hat{z} | 1 0 0 \rangle = \text{cost} \cdot \delta_{l,1} \delta_{m,0}$$

dove la costante risulta dall'integrale in  $r$ . NOTA BENE:  $\delta_{m,0}$  deriva dalla **simmetria cilindrica**, quindi ci sarebbe stato per ogni potenziale in cui compare  $z$  sottoforma di potenza ( $z, z^2, z^3, \dots$ );  $\delta_{l,0}$  invece è una conseguenza del fatto che la **perturbazione è lineare**. Si noti che ora la somma nella (3.1.1) diventa estesa solo agli  $n$ .

Ora, facendo dei calcoli molto difficili, si potrebbe fare l'integrale in  $r$  e trovare il valore preciso, ma ci limitiamo a estrarre la dipendenza dimensionale. Si ricorda che  $|\langle n l 0 | \hat{z} | 1 0 0 \rangle|^2$  deve avere dimensioni di una lunghezza al quadrato.

$$|\langle n l 0 | \hat{z} | 1 0 0 \rangle|^2 = a_0^2 f(n)$$

Richiamando il fatto che per l'atomo di idrogeno

$$E_n^{(0)} = \frac{1}{2} \mu c^2 \alpha^2 \frac{1}{n^2}$$

E' finalmente possibile scrivere la correzione al secondo ordine, inserendo nella (3.1.1)

$$E_{100}^{(2)} = -q^2 \mathcal{E}^2 a_0^2 \sum_{n=2}^{\infty} \frac{f(n)}{\frac{1}{2} \mu c^2 \alpha^2 (1 - \frac{1}{n^2})}$$

Concludiamo che, all'ordine minore possibile in  $\mathcal{E}$ , la correzione sullo stato fondamentale  $1s$  è quadratica. Ogni termine della serie è positivo, per cui lo **stato fondamentale diminuisce la sua energia** in seguito a questa perturbazione.

### 3.1.2 Effetto stark sul primo stato eccitato $n = 2$

Lo stato con  $n = 2$  è **4 volte degenere**, infatti ad esso corrispondono i seguenti *ket*:

$$|n l m\rangle = |2 0 0\rangle; \quad |2 1 0\rangle; \quad |2 1 1\rangle; \quad |2 1 -1\rangle;$$

Di conseguenza, per ottenere le correzioni al primo ordine, dobbiamo diagonalizzare  $\hat{H}_P$  nel sottospazio degenere  $4 \times 4$  generato da questi 4 stati. Ci occupiamo quindi ora di trovare gli elementi di matrice in questo spazio.

Abbiamo già notato, grazie alla **simmetria cilindrica** di  $\hat{z}$ , che vale la seguente regola di selezione

$$\langle 2 l m | \hat{z} | 2 l' m' \rangle = \text{cost} \cdot \delta_{mm'}$$

Quindi tutti gli elementi con  $m \neq m'$  sono nulli.

$$\hat{z} \doteq \left( \begin{array}{cc|cc} \langle 2 0 0 | z | 2 0 0 \rangle & \langle 2 0 0 | z | 2 1 0 \rangle & & \\ \langle 2 1 0 | z | 2 0 0 \rangle & \langle 2 1 0 | z | 2 1 0 \rangle & & \\ \hline & 0 & \langle 2 1 1 | z | 2 1 1 \rangle & 0 \\ & & 0 & \langle 2 1 -1 | z | 2 1 -1 \rangle \end{array} \right)$$

Possiamo sfruttare la **parità** per semplificare ancora di più la matrice.

- Lo stato generico " $l$ " ha parità definita  $(-1)^l$
- L'operatore  $\hat{z}$  è dispari

$\Rightarrow$  se  $l_1 + l_2$  è pari allora il valore di aspettazione di  $\hat{z}$  è zero. Infatti verrebbe l'integrale su tutto lo spazio di una funzione pari per una dispari, dato che l'effetto dell'operatore  $\hat{z}$  è solo una moltiplicazione per  $z$ . Concludiamo che gli elementi sulla diagonali sono nulli ( $l + l = 2l$  pari). Gli unici elementi  $\neq 0$  sono quelli con  $l = 1$  e  $l = 0$  contemporaneamente. Inoltre, l'operatore è Hermitiano, quindi sono uno il complesso coniugato dell'altro.

$$\hat{z} \doteq \left( \begin{array}{cc|cc} 0 & A & 0 & 0 \\ A^* & 0 & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{array} \right)$$

Con  $A = \langle 2 0 0 | z | 2 1 0 \rangle$ . Procediamo a diagonalizzare il blocco in alto a sinistra. Si tratta di un'equazione agli autovalori. Reintroduciamo il fattore  $q\mathcal{E}$  per ottenere direttamente le correzioni all'energia come autovalori.

$$q\mathcal{E} \begin{pmatrix} 0 & A \\ A^* & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{pmatrix} = E_2^{(1)} \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{pmatrix}$$

Il sistema è facilmente risolvibile una volta trovato  $A$ .

$$\begin{aligned} A = \langle 2 0 0 | z | 2 1 0 \rangle &= \int_0^\infty dr r^2 \frac{1}{(2a_0)^3} e^{r/2a_0} \frac{2r}{\sqrt{3}a_0} \left(1 - \frac{r}{2a_0}\right) r \int d\Omega Y_0^{0*} \sqrt{\frac{4\pi}{3}} Y_1^0 Y_1^0 \\ &= -3a_0 \end{aligned}$$

Tornando al sistema e svolgendo i calcoli si ottiene

$$\boxed{E_2^{(1)} = \pm 3a_0 q\mathcal{E}} \quad \text{LO SPOSTAMENTO DELLE RIGHE SPETTRALI E' LINEARE IN } \mathcal{E}$$

Gli autovettori sono ovviamente

$$\mathbf{v}_- = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad \mathbf{v}_+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

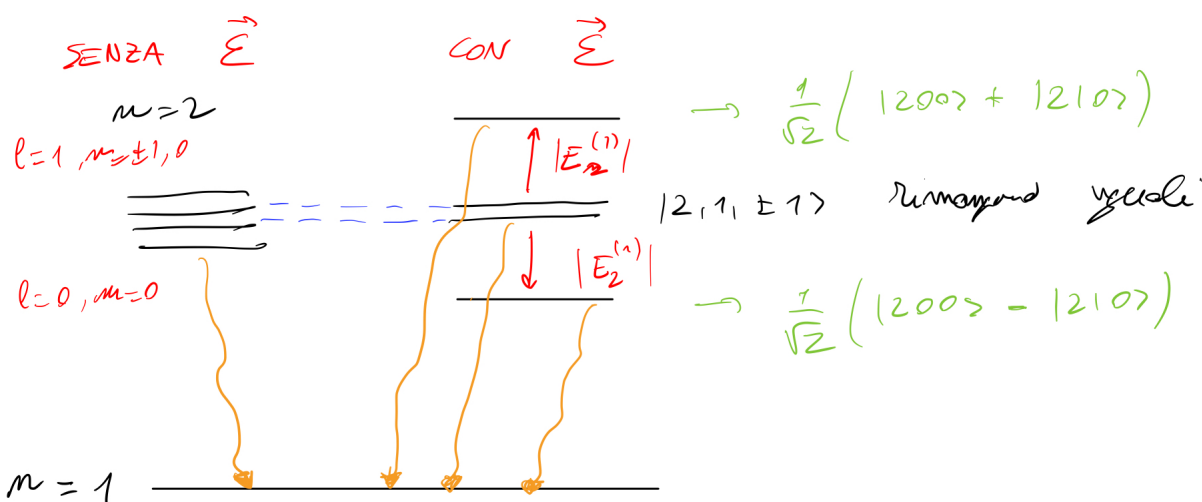


Si ricorda che questi vettori sono nel sottospazio generato da  $|200\rangle$  e  $|210\rangle$  e quindi le componenti sono relative a questa base.

### COMMENTI - COSA SUCCEDDE AI LIVELLI

Gli stati  $|2, 1, \pm 1\rangle$  rimangono alla stessa energia dato che le correzioni sono nulle. I due stati con  $m = 0$  vengono modificati invece.

$$\begin{aligned} |210\rangle &\mapsto \frac{1}{\sqrt{2}} (|200\rangle - |210\rangle) & \text{con energia} & E_2 \mapsto E_2 - |E_2^{(1)}| \\ |200\rangle &\mapsto \frac{1}{\sqrt{2}} (|200\rangle + |210\rangle) & \text{con energia} & E_2 \mapsto E_2 + |E_2^{(1)}| \end{aligned}$$



Questo vuol dire che SE l'atomo si può diseccitare e quindi emettere radiazione, allora nel caso  $\mathcal{E} = 0$  si osserva una riga dovuta alla diseccitazione degli stati con  $n = 2$ , mentre con  $\mathcal{E} \neq 0$  se ne osservano 3, di cui una nella stessa posizione.

### COMMENTI SULLA SIMMETRIA

Il problema imperturbato ha **simmetria sferica**, quindi di conservano  $L_z$  e  $L^2$ , ma accendendo un campo elettrico parallelo a  $z$  la simmetria si riduce ad una **cilindrica** (cioè per rotazioni attorno all'asse  $z$ ) e quindi si conserva solo  $L_z$ . Allora, per meglio descrivere il problema, è necessario utilizzare autofunzioni con simmetria cilindrica. Il numero quantico " $m$ " continua a essere valido. Come conseguenza di questo, ci si poteva già aspettare che gli stati con  $m$  diverso,  $|21 + 1\rangle$  e  $|21 - 1\rangle$ , non si sarebbero combinati, mentre quelli con  $m = 0$  sì. Abbiamo ottenuto una precisa combinazione di quest'ultimi, ma in generale gli stati perturbati sarebbero potuti essere:

- 1)  $|21 + 1\rangle$
- 2)  $|21 - 1\rangle$
- 3)  $\sin \vartheta |200\rangle + \cos \vartheta e^{i\delta} |210\rangle$
- 4)  $\cos \vartheta |200\rangle - \sin \vartheta e^{-i\delta} |210\rangle$

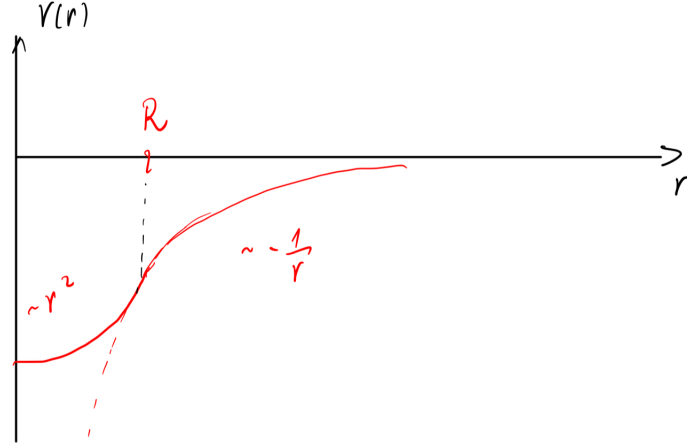


Figura 3.2.1: Potenziale generato da una sfera uniformemente carica

Cioè il 3) è la più generica combinazione possibile degli stati con  $m = 0$  e il 4) è il suo ortogonale.

## 3.2 Effetti delle dimensioni finite del nucleo su un atomo idrogenoide

I livelli energetici e gli stati stazionari dell'atomo di idrogeno sono stati studiati considerando il nucleo come una carica puntiforme che genera un potenziale Coulombiano che va come  $1/r$ , però nella realtà non è così. Il nucleo non è affatto puntiforme, ma anzi la sua carica occupa un volume dell'ordine di  $10^{-15} m$  e questo modifica il potenziale sentito dall'elettrone. Per studiare gli effetti della finitezza delle dimensioni del nucleo sui livelli energetici è possibile modellizzare il nucleo in diversi modi, tre dei quali sono:

1. Il nucleo è una sfera carica uniformemente con raggio  $R \ll a_0$
2. Il nucleo è una superficie sferica con la carica distribuita uniformemente sulla superficie
3. Il nucleo è un guscio sferico caricato uniformemente, con raggio interno  $R_1$  e raggio esterno  $R_2$

Trattiamo il caso 1.

### 3.2.1 Identificazione dell'Hamiltoniana

Applicando la Legge di Gauss per il campo elettrico si ricava il potenziale generato da una sfera uniformemente carica:

$$V(r) = -Zq \int \mathbf{E} \cdot d\mathbf{r} = \begin{cases} -\frac{Ze^2}{r} & r \geq R \\ \frac{Ze^2}{2R^3} (r^2 - 3R^2) & r \leq R \end{cases}$$

Il grafico del potenziale è rappresentato in figura (3.2.1). A questo punto possiamo scrivere l'Hamiltoniana del sistema:

$$\hat{H} = -\frac{\nabla^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r} + \left[ \frac{Ze^2}{2R^3} (r^2 - 3R^2) + \frac{Ze^2}{r} \right] \theta(R - r)$$

Scrivendola in questa forma è facile utilizzare la notazione usata fin ora. Diciamo quindi che

$$\hat{H}_0 = -\frac{\nabla^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r} \quad \text{e} \quad \hat{H}_P = \left[ \frac{Ze^2}{2R^3}(r^2 - 3R^2) + \frac{Ze^2}{r} \right] \theta(R - r)$$

Si noti che la parte perturbativa rappresenta proprio la differenza tra il potenziale effettivo e quello generato da una carica puntiforme.

### 3.2.2 Calcolo della correzione al primo ordine

Ci occupiamo di studiare gli effetti solo sullo stato fondamentale, che non è degenere. La sua rappresentazione sullo spazio delle coordinate (sferiche) è

$$\langle r \vartheta \varphi | 100 \rangle = R_{10}(r) Y_0^0(\vartheta, \varphi)$$

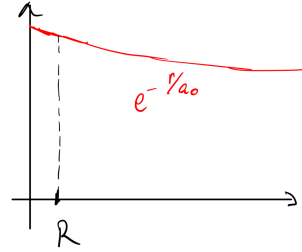
Quindi siamo pronti a calcolare la correzione

$$\begin{aligned} E_1^{(1)} &= \langle 100 | \hat{H}_P | 100 \rangle = \\ &= \int_0^\infty dr r^2 \int d\Omega H_P |R_{10}(r) Y_0^0(\vartheta, \varphi)|^2 = \\ &= 4 \frac{Z^3}{a_0^3} \int_0^R dr e^{Zr/a_0} Z e^2 \left[ \frac{1}{2R^2}(r^4 - 3R^2 r^2) + r \right] \end{aligned}$$

Dove abbiamo fatto uso del fatto che

- $\int d\Omega |Y_0^0(\vartheta, \varphi)|^2 = \langle 00 | 00 \rangle = 1$
- $R_{10} = 2 \sqrt{\frac{Z^3}{a_0^3}} e^{Zr/a_0}$

Ricordiamo che  $R \approx 10^{-15} m$  e  $a_0 \approx 10^{-10} m$ , quindi nell'intervallo  $(0, R)$  ci stiamo spostando "poco" dall'origine dal punto di vista dell'esponenziale. Allora è ragionevole risolvere l'integrale considerando l'esponenziale come costante in questa regione. Intanto ridefiniamo la variabile di integrazione come  $x = r/R$ .



$$\begin{aligned} E_1^{(1)} &= 4 \frac{Z^3}{a_0^3} Z e^2 R \int_0^1 dx \left[ \frac{1}{2R^3}(x^4 R^4 - 3R^4 x^2) + xR \right] = 2 \frac{Z^3}{a_0^3} Z e^2 R^2 \int_0^1 dx (x^4 - 3x^2 + 2x) = \\ &= 2 \frac{Z^3}{a_0^3} Z e^2 R^2 \left[ \frac{x^5}{5} - x^3 + x^2 \right]_0^1 = \frac{2}{5} \frac{Z^4 e^2 R^2}{a_0^3} \end{aligned}$$

Ora, introducendo  $E_0 = \frac{e^2}{2a_0}$  si ottiene

$$E_{100}^{(1)} = \frac{4}{5} Z^4 E_0 \left( \frac{R}{a_0} \right)^2$$

Ricordando che  $R/a_0 \approx 10^{-5}$  si può osservare che la correzione al primo ordine utilizzando questo modello di nucleo è molto piccola nel caso dell'atomo di idrogeno ( $Z = 1$ ). L'effetto è molto più intenso per ioni idrogenoidi più pesanti, dato che dipende dalla quarta potenza del numero atomico.

## Capitolo 4

# Struttura fine e iperfine dell'atomo di idrogeno (in via di aggiornamento)

Le forze di maggiore intensità all'interno degli atomi sono quelle Coulombiane. Sono trattate scegliendo come hamiltoniana per l'atomo di idrogeno la seguente:

$$\hat{H}_0 = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(r) \quad \text{con} \quad V(r) = -\frac{e^2}{r}$$

In realtà, questa espressione è solo approssimata, infatti non tiene conto di altri effetti, come per esempio quelli relativistici e quelli dovuti allo spin dell'elettrone. Inoltre, non è ancora stato introdotto lo spin del protone.

Nella realtà dei fatti, questi errori sono molto piccoli, ma nonostante questo l'accuratezza degli esperimenti di spettroscopia ha reso possibile l'osservazione di fenomeni non spiegabili con questa hamiltoniana. In questo capitolo verranno introdotti dei termini correttivi che daranno spiegazione della cosiddetta **struttura fine** dell'atomo di idrogeno. Un piccolo paragrafo sarà dedicato ai termini di **struttura iperfine**, la cui origine non sarà dimostrata in modo formale. Alla fine verrà utilizzato il metodo perturbativo per valutare gli effetti dei termini di struttura fine sullo spettro atomico degli atomi idrogenoidi.

## 4.1 LA STRUTTURA FINE

### 4.1.1 Effetti relativistici: il termine cinetico

#### Origine fisica

Partiamo dall'espressione relativistica per una particella classica di massa a riposo  $m$  e momento  $\mathbf{p}$ :

$$E = c\sqrt{p^2 + m^2c^2} = mc^2 \left[ 1 + \left( \frac{p}{mc} \right)^2 \right]^{1/2}$$

e ricordiamo che  $p/mc \ll 1$ , quindi effettuiamo un'espansione di Taylor

$$E = mc^2 \left[ 1 + \frac{1}{2} \left( \frac{p}{mc} \right)^2 - \frac{1}{8} \left( \frac{p}{mc} \right)^4 + \dots \right] = mc^2 + \frac{p^2}{2m} - \frac{p^4}{8m^3c^2}$$

In aggiunta all'energia a riposo ( $mc^2$ ) e all'energia cinetica non relativistica ( $p^2/2m$ ) troviamo il cosiddetto **TERMINE CINETICO** della struttura iperfine

$$\hat{H}_K = -\frac{p^4}{8m^3c^2}$$

## Ordine di grandezza

Per valutare l'importanza di questo termine calcoliamone il rapporto con  $\hat{H}_0$ :

$$\frac{\hat{H}_K}{\hat{H}_0} = \frac{\frac{p^4}{8m^3c^2}}{\frac{p^2}{2m}} \simeq \left(\frac{p}{mc}\right)^2 = \left(\frac{mv}{mc}\right)^2 = \left(\frac{v}{c}\right)^2 = \alpha^2 \simeq \left(\frac{1}{137}\right)^2$$

Quindi  $\hat{H}_K$  è del **secondo ordine in  $\alpha$  rispetto a  $\hat{H}_0$** .

### 4.1.2 Spin dell'elettrone: il termine spin-orbita

#### Origine fisica

L'elettrone possiede la proprietà intrinseca dello spin, per cui si comporta come un piccolo magnete con momento

$$\boldsymbol{\mu} = g \frac{q}{2m} \mathbf{S}$$

L'elettrone si muove con velocità  $\mathbf{v}$  nel campo elettrostatico  $\mathbf{E}$  generato dal protone, quindi nel sistema di riferimento dell'elettrone c'è un campo magnetico  $\mathbf{B}'$  dato da:

$$\mathbf{B}' = -\frac{1}{c^2} \mathbf{v} \wedge \mathbf{E}$$

al primo ordine in  $v/c$ . Di conseguenza, l'elettrone ha un'energia potenziale

$$\mathcal{E}_P = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B}' \quad (4.1.1)$$

Ora riscriviamo il campo elettrico  $\mathbf{E}$ :

$$q\mathbf{E} = -\frac{dV(r)}{dr} \frac{\mathbf{r}}{r} \implies \mathbf{E} = -\frac{1}{q} \frac{dV(r)}{dr} \frac{\mathbf{r}}{r}$$

Inserendo in (4.1.1) si ottiene

$$\mathcal{E}_P = -g \frac{q}{2m} \mathbf{S} \cdot \frac{1}{c^2} (\mathbf{v} \wedge \mathbf{r}) \frac{1}{q} \frac{dV(r)}{dr} \frac{1}{r} = \frac{g}{2m^2c^2} (\mathbf{r} \wedge m\mathbf{v}) \cdot \mathbf{S} \frac{1}{r} \frac{dV(r)}{dr}$$

Da cui possiamo concludere che

$$\mathcal{E}_P = \frac{g}{2m^2c^2} \frac{1}{r} \frac{dV(r)}{dr} \mathbf{L} \cdot \mathbf{S}$$

In realtà in questo calcolo manca un termine di correzione che nasce per ragioni puramente cinematiche, cioè dalla **precessione di Thomas**, la quale causa un contributo all'energia potenziale di questa forma:

$$\mathcal{E}_P^T = \mathbf{S} \cdot \boldsymbol{\omega}_T \quad \text{con} \quad \boldsymbol{\omega}_T = -\frac{1}{2m^2c^2} \frac{1}{r} \frac{dV(r)}{dr} \mathbf{L}$$

In definitiva, tenendo conto di questo effetto e sostituendo  $V(r) = -e^2/r$ , si ottiene il **TERMINE DI INTERAZIONE SPIN-ORBIT**:

$$H_{SO} = \frac{g-1}{2m^2c^2} \frac{e^2}{r^3} \mathbf{L} \cdot \mathbf{S}$$

## Ordine di grandezza

In questo caso confrontiamo  $H_{SO}$  con la parte di energia potenziale di  $\hat{H}_0$  e, ricordando che sia il momento angolare orbitale che quello di spin sono dell'ordine di  $\hbar$  otteniamo:

$$\frac{H_{SO}}{H_0} = \frac{\frac{1}{m^2 c^2} \frac{e^2}{r^3} \hbar^2}{\frac{e^2}{r}} = \left( \frac{\hbar}{mcr} \right)^2$$

Ma  $r \simeq a_0 = \hbar^2 / me^2$  quindi

$$\frac{H_{SO}}{H_0} = \frac{e^4}{\hbar^2 c^2} = \alpha^2$$

Anche in questo caso, la correzione è al secondo ordine in  $\alpha$  rispetto ad  $\hat{H}_0$ .

### 4.1.3 Termine di Darwin

#### Origine fisica

Questo termine si ottiene facendo il limite non relativistico della Equazione di Dirac e quindi non verrà trattato in queste note. Il termine vale

$$\frac{\hbar^2}{8m^2 c^2} \nabla^2 V(r) = -\frac{e^2 \hbar^2}{8m^2 c^2} \nabla^2 \left( \frac{1}{r} \right)$$

E usando il fatto che il Laplaciano di  $1/r$  è uguale a  $-4\pi\delta(r)$  si ottiene

$$H_D = \frac{\pi e^2 \hbar^2}{2m^2 c^2} \delta^3(\mathbf{r})$$

## Ordine di grandezza

Per stimare le dimensioni di questo termine calcoliamo in valore medio su un generico stato atomico

$$\langle H_D \rangle = \frac{\pi e^2 \hbar^2}{2m^2 c^2} |\psi(0)|^2 \quad (4.1.2)$$

Quindi il termine di Darwin influenza solo gli elettroni  $s$ , cioè quelli con  $l = 0$ , che sono gli unici ad avere funzione d'onda valutata nell'origine diversa da 0 (Si ricorda che  $R_{nl}(r)$  va come  $r^l$  per  $r$  piccolo). L'ordine di grandezza di  $|\psi(0)|^2$  può essere stimato imponendo che l'integrale del modulo quadro della funzione d'onda su un volume dell'ordine di  $a_0^3$  sia 1. La parte esponenziale si annulla velocemente quindi la funzione può essere considerata costante in questo volume:

$$\int_0^{a_0} d^3r |\phi(r)|^2 \simeq 1 \simeq |\phi(0)|^2 \int_0^{a_0} d^3r \simeq |\phi(r)|^2 a_0^3$$

Quindi, inserendo in (4.1.2)

$$H_D \simeq \frac{\pi e^2 \hbar^2}{2m^2 c^2} \frac{1}{a_0^3} = \frac{\pi e^2 \hbar^2}{2m^2 c^2} \left( \frac{me^2}{\hbar^2} \right)^3 = mc^2 \alpha^4$$

e quindi

$$\frac{H_D}{H_0} = \frac{mc^2\alpha^4}{mc^2\alpha^2} = \alpha^2$$

Come gli altri due termini di struttura fine.

## RIASSUNTO: HAMILTONIANA DELLA STRUTTURA FINE

$$H_F = -\frac{p^4}{8m^3c^2} + \frac{g-1}{2m^2c^2} \frac{e^2}{r^3} \mathbf{L} \cdot \mathbf{S} + \frac{\pi e^2 \hbar^2}{2m^2c^2} \delta^3(\mathbf{r})$$

Ogni termine aggiuntivo di struttura fine è al **secondo ordine in  $\alpha$  rispetto a  $H_0$**

## 4.2 LA STRUTTURA IPERFINE

### 4.2.1 Origine fisica

L'origine dei termini di struttura iperfine risiedono nel fatto che anche il **protone** ha spin (1/2) e di conseguenza ha un **momento magnetico** e di conseguenza l'elettrone ci interagirà. Sia  $\mathbf{I}$  l'osservabile corrispondente allo spin del protone. Il corrispondente momento magnetico è

$$\mathbf{M}_I = g_p \frac{q}{2m_p} \mathbf{I}$$

Il rapporto giromagnetico del protone vale:  $g_p \simeq 5.585$ . La principale differenza con il momento magnetico dell'elettrone è che  $m_p \simeq 2000m_e$  e quindi gli effetti del magnetismo nucleare sono molto più deboli rispetto a quelli del magnetismo elettronico.

### 4.2.2 Termine di interazione con campo magnetico

L'elettrone è una carica in moto, per cui interagisce con il campo magnetico generato dal momento del protone. Il termine che rende conto di questa interazione è

$$-\frac{\mu_0}{4\pi} \frac{1}{m_e r^3} \mathbf{L} \cdot \mathbf{M}_I$$

### 4.2.3 Termine di interazione dipolo-dipolo

L'elettrone ha un momento di dipolo magnetico, per cui interagisce con quello del protone. Il termine di interazione è

$$-\frac{\mu_0}{4\pi} \frac{1}{r^3} [3(\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{n})(\mathbf{M}_I \cdot \mathbf{n}) - \boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{M}_I]$$

dove  $\mathbf{n} = \frac{\mathbf{r}}{r}$  è il versore che unisce protone ed elettrone.

### 4.2.4 Termine di contatto di Fermi

Nella realtà il protone non è puntiforme e il campo magnetico al suo interno è diverso da quello generato dal suo momento magnetico. Questo ultimo termine rende conto dell'interazione tra il momento magnetico dell'elettrone e il campo magnetico all'interno del protone. Vale

$$-\frac{\mu_0}{4\pi} \frac{8\pi}{3} \boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{M}_I \delta^3(\mathbf{r})$$

## Ordine di grandezza

L'ordine di grandezza dei primi due termini è

$$\frac{q^2 \hbar^2}{m_p m r^3} \frac{\mu_0}{4\pi} \simeq \frac{e^2 \hbar^2}{m_p m c^2} \frac{1}{r^3}$$

Confrontandoli con il termine spin-orbit dell'hamiltoniana di struttura fine

$$H_{SO} = \frac{e^2 \hbar^3}{m^2 c^2} \frac{1}{r^3} \Rightarrow \frac{H_{HF}}{H_{SO}} = \frac{m_p}{m} \simeq \frac{1}{2000}$$

Il termine di contatto di Fermi può essere confrontato con il termine di Darwin per far vedere che il rapporto è lo stesso.

### RIASSUNTO: HAMILTONIANA DI STRUTTURA IPERFINE

$$H_{HF} = -\frac{\mu_0}{4\pi} \left\{ \frac{1}{m_e r^3} \mathbf{L} \cdot \mathbf{M}_I + \frac{1}{r^3} [3(\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{n})(\mathbf{M}_I \cdot \mathbf{n}) - \boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{M}_I] + \frac{8\pi}{3} \boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{M}_I \delta^3(\mathbf{r}) \right\}$$



# Appendice A

## Elettromagnetismo

### Ricorda

- il dipolo elettrico è definito come

$$\mathbf{p} = q\mathbf{d}$$

dove  $\mathbf{d}$  è il vettore che parte dalla carica negativa e arriva alla carica positiva.

- il dipolo magnetico è definito come

$$\boldsymbol{\mu} = ia\hat{\mathbf{n}}$$

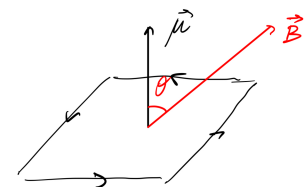
dove  $a$  è l'area della spira e  $\hat{\mathbf{n}}$  il versore perpendicolare all'area e di verso individuato dalla regola della mano destra utilizzata rispetto al verso della corrente.

### A.1 Interazione tra dipolo magnetico e campo magnetico

#### Momento torcente

Trattiamo un dipolo magnetico  $\boldsymbol{\mu}$  immerso in un campo magnetico esterno  $\mathbf{B}$ . Il dipolo viene modellizzato come una piccola spira quadrata di lato  $b$  percorsa da una corrente  $i$  in senso antiorario. La forza è data dalla legge di Laplace  $d\mathbf{F} = i d\mathbf{l} \wedge \mathbf{B}$ . Dato che tutti i tratti di circuito sono rettilinei si ottiene  $F = ibB$  e quindi è possibile calcolare il **momento torcente** agente sulla spira.

$$\tau = Fb \sin \vartheta = ib^2 B \sin \vartheta \quad \Rightarrow \quad \boxed{\tau = \boldsymbol{\mu} \wedge \mathbf{B}}$$

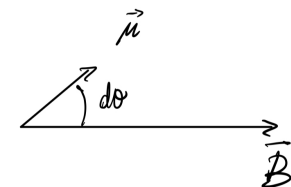


Dato che  $\boldsymbol{\mu} = ib^2\hat{\mathbf{n}}$ .

#### Energia potenziale

Ora calcoliamo l'energia potenziale del sistema, partendo dall'effetto che una rotazione infinitesima ha sulla spira.

$$\begin{aligned} dU_m &= -dW = -\tau d\vartheta = -\mu B \sin \vartheta d\vartheta \\ \Rightarrow U_m &= \int_0^\vartheta d\vartheta \tau B \sin \vartheta = -\mu B \cos \vartheta + c \end{aligned}$$



Quindi, dato che l'energia potenziale è definita a meno di una costante

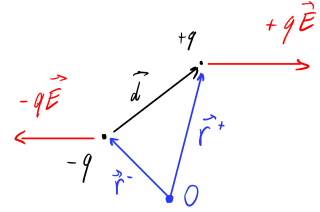
$$\boxed{U_m = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B}}$$

## A.2 Interazione tra dipolo elettrico e campo elettrico

### Momento torcente

Il dipolo elettrico viene modellizzato come un sistema di due cariche uguali in modulo ma segno opposto ( $\pm q$ ) poste ad una distanza  $d$  l'una dall'altra. Quando viene immerso in un campo elettrico esterno si crea una coppia di forze che dà origine ad un momento torcente.

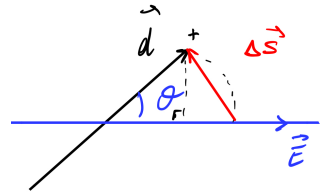
$$\begin{aligned}\boldsymbol{\tau} &= \mathbf{r}_+ \wedge \mathbf{F}_+ + \mathbf{r}_- \wedge \mathbf{F}_- = q(\mathbf{r}_+ - \mathbf{r}_-) \wedge \mathbf{E} = q\mathbf{d} \wedge \mathbf{E} \\ \Rightarrow \quad \boldsymbol{\tau} &= \mathbf{p} \wedge \mathbf{E}\end{aligned}$$



### Energia potenziale

Anche in questo caso partiamo dal lavoro fatto dal campo elettrico per ruotare il dipolo di un angolo  $\vartheta$ .

$$\begin{aligned}dW &= q\mathbf{E} \cdot d\mathbf{s} \Rightarrow W_+ = qE \left( \frac{d}{2} - \frac{d}{2} \cos \vartheta \right) = qE \frac{d}{2} (1 - \cos \vartheta) = W_- \\ \Rightarrow W &= qEd(1 - \cos \vartheta) = pE(1 - \cos \vartheta) \Rightarrow U_E = -\mathbf{p} \cdot \mathbf{E}\end{aligned}$$



## A.3 Interazione tra carica e campo elettrico uniforme

In generale, l'energia potenziale di una carica puntiforme  $q$  immersa in un campo elettrico  $\mathbf{E}$  è data da

$$U_E = -W_E = -\int_0^r \mathbf{F}_E(r') \cdot d\mathbf{r}' = -q \int_0^r \mathbf{E}(\mathbf{r}') \cdot d\mathbf{r}' = -q \int_0^r E(\mathbf{r}') \cos \vartheta dr'$$

Ma nel caso di campo uniforme  $\mathbf{E}(\mathbf{r}') = \mathbf{E}$  e si può portare il campo fuori dall'integrale.

$$U_E = -qE \cos \vartheta \int_0^r dr' = -qE \cos \vartheta r \Rightarrow U_E = -q\mathbf{E} \cdot \mathbf{r}$$

# Appendice B

## Matematica

### B.1 Il laplaciano di $1/r$

Si vuole dimostrare che

$$\nabla^2 \left( \frac{1}{r} \right) = -4\pi \delta^{(3)}(\mathbf{r})$$

Cominciamo con il notare che

$$\nabla^2 \left( \frac{1}{r} \right) = \nabla \cdot \nabla \left( \frac{1}{r} \right) = -\nabla \cdot \left( \frac{\hat{\mathbf{r}}}{r^2} \right)$$

E ora separiamo due casi:

a)  $r \neq 0$

$$\nabla^2 \left( \frac{1}{r} \right) = -\nabla \cdot \left( \frac{\hat{\mathbf{r}}}{r^2} \right) = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{1}{r^2} \right) = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (1) = 0$$

Quindi il laplaciano di  $1/r$  è nullo per ogni punto dello spazio che non sia l'origine. Ora analizziamo cosa succede per

b)  $r = 0$

Ricordiamo innanzitutto il Teorema di Gauss (o della divergenza), secondo il quale l'integrale sul volume della divergenza di un campo vettoriale è uguale al flusso del campo attraverso la superficie che lo contiene, in formule:

$$\int_V \nabla \cdot \mathbf{F} dV = \int_{\partial V} \mathbf{F} \cdot d\mathbf{a}$$

Per studiare il comportamento del laplaciano di  $1/r$  nell'origine integriamo su una sfera centrata in 0 e di raggio  $r$  e utilizziamo il Teorema di Gauss.

$$\int_{B_r(0)} \nabla \cdot \left( \frac{\hat{\mathbf{r}}}{r^2} \right) d^3r = \int_{\partial V} \frac{\hat{\mathbf{r}}}{r^2} \cdot d\mathbf{a}$$

Ricordando che l'elemento di area per una sfera di raggio  $r$  è  $d\mathbf{a} = r^2 \sin \vartheta d\vartheta d\varphi \hat{\mathbf{r}}$  si ottiene

$$\begin{aligned} \int_{B_r(0)} \nabla^2 \left( \frac{1}{r} \right) dV &= - \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi d\vartheta \sin \vartheta \int_{\mathbb{R}^3} \frac{1}{r^2} = -2\pi \left[ -\cos \vartheta \right]_0^\pi = -2\pi(1+1) = -4\pi = \\ &= - \int_{B_r(0)} 4\pi \delta^{(3)}(\mathbf{r}) dV \end{aligned}$$

Da cui si può concludere che

$$\nabla^2 \left( \frac{1}{r} \right) = -4\pi \delta^{(3)}(\mathbf{r})$$