Formulario di Meccanica Quantistica

10 dicembre 2011

1 Parte I: matematica/princìpi

Data una funzione d'onda $\psi(x)$, (ampiezza di probabilità) per essere una $p.d.f.$ per una osservabile deve essere normalizzata a uno, ossia: $\int_{\mathbb{R}} |\psi(x)|^2 \, dx = 1$.
La probabilità si ricava come $P(x \in [x_0, x_0 + dx]) = |\psi(x_0)|^2$.

1.1 Trasformata di Fourier in MQ

$$\hat{\psi}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}^3} \int_{\mathbb{R}} d^3x \, \psi(x,0) e^{-\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}}$$

Proprietà:

$$I) \quad \hat{\frac{df}{dx}} = i\frac{p}{h}\hat{f}(p) \qquad\qquad II) \quad (\hat{xf}) = i\hbar\frac{d}{dp}\hat{f}(p)$$

$$III) \quad \psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}^3} \int_{\mathbb{R}} d^3p \, \hat{\psi}(x,0) e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}}$$

$$IV) \quad \int_{\mathbb{R}} \overline{g(x)} f(x) dx = \int_{\mathbb{R}} \overline{\hat{g}(p)} \hat{f}(p) dp \qquad \Longrightarrow \qquad \int_{\mathbb{R}} |f(x)|^2 dx = \int_{\mathbb{R}} |\hat{f}(p)|^2 dp$$

Medie $m-esime$ e "spread" data una funzione ampiezza di probabilità:

$$\langle x^n \rangle = \int_{\mathbb{R}} x^n |\psi|^2 \qquad\qquad \Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2}$$

1.2 Basi discrete e continue

Una insieme di vettori è sonc se:

$$\langle n| \, |m\rangle = \delta_{mn} \qquad \sum_n |n\rangle \langle n| = \mathbb{I}$$

con $\mathbb{I}$ operatore Identità. Per le basi continue:

$$\int_{\mathbb{R}} dx \, \overline{\varphi_p(x)} \varphi'_p(x) = \delta(p - p') \qquad \int_{\mathbb{R}} dp \, |\varphi_p\rangle \langle \varphi_p| = \mathbb{I}$$

1.3 Velocità di fase e di gruppo

$$v_f = \frac{\omega}{k} \qquad\qquad v_g = \frac{d\omega}{dk} = v_{classica}$$

1.4 δ di Dirac

Definizione:

$$\int_{\mathbb{R}} \delta(x - x_0) f(x) dx = f(x_0) \qquad \approx \qquad \delta(x) = \begin{cases} 0, & x \neq 0 \\ \infty, & x = 0 \end{cases}$$

Caso in cui gli zeri della δ definiti dagli zeri di una generica funzione $g(x)$ con n zeri (x_i):

$$\int_{\mathbb{R}} \delta(g(x)) f(x) dx = \int_{\mathbb{R}} \sum_{i=1}^{n} \frac{\delta(x - x_i)}{|g'(x_i)|} f(x) dx = \sum_{i=1}^{n} \frac{f(x_i)}{|g'(x_i)|}$$

Piccola formula priva di senso (non dovrebbe convergere):

$$\int_{\mathbb{R}} \frac{dk}{2\pi} e^{ikx} = \delta(x)$$

1.5 Trucco per Trasformata di Fourier in sferiche, con $\psi(r)$

Concettualmente: ho $\psi(x)$ e voglio ottenere $\hat{\psi}(p)$, pensandola con p fissato. Vedendola così, metto p nella direzione dell'asse $\hat{\mathbf{z}}$, "privilegiato" nelle sferiche.

$$\hat{\psi}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}^3} \int_{\mathbb{R}} d^3x\, \psi(x,0) e^{-\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}} = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}^3} \int_{\mathbb{R}} \psi(r) e^{-\frac{i}{\hbar}pr\cos(\theta)} r^2 \sin(\theta) d\theta d\phi =$$

Si pone $t = \cos(\theta)$, e si sbatte via il $\sin(\theta)$

2 Accenni di MQ

2.1 Evoluzione temporale di un pacchetto

Data la $\hat{psi}$ ottengo la $\psi(x,t)$:

$$\hat{\psi} \Longrightarrow \psi(x,t) = \int_{\mathbb{R}} \frac{dp}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar}(px - \frac{p^2 t}{2m})}$$

2.1.1 Pacchetto con distribuzione momenti gaussiana

$$\hat{\psi} = \left(\frac{a^2}{2\pi\hbar^2}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{a^2}{4\hbar^2}(p-p_0)^2}$$

$$\psi(x,t) = \left(\frac{2a^2}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{a^2 + \frac{2i\hbar t}{m}}} e^{-\frac{(x-\frac{p_0 t}{m})}{a^2+\frac{2i\hbar t}{m}} \frac{i}{\hbar} p_0 x - \frac{i}{\hbar}\frac{p_0^2 t}{2m}}$$

2.2 Equazione di Schrödinger

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi\rangle = -\frac{\hbar^2}{2m}|\psi\rangle + V|\psi\rangle = \mathcal{H}|\psi\rangle$$

Inoltre si ricava che:

$$E \geq V_{min}$$

dove V_{min} è il minimo del potenziale.

2.2.1 Equazione di continuità

$$\frac{\partial|\psi|^2}{\partial t} + \boldsymbol{\nabla}\cdot\left(\overline{\psi}\,\nabla^2\psi - \psi\,\nabla^2\overline{\psi}\right) = 0$$

2.3 Problemi stazionari monodimensionali

Caso in cui $V = V(x)$, ossia indipendente dal tempo:

$$\psi(x,t) = \varphi(x)\, e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \qquad \varphi(x) \in L^2(\mathbb{R})$$

Sbattendo dentro l'ansatz nell'equazione di Schrödinger otteniamo la SSE (stationary Schrödinger equation):

$$-\frac{\hbar}{2m}\nabla^2\varphi(x) + V(x)\varphi(x) = E\varphi(x)$$

2.3.1 Condizioni di raccordo

$V(x)$ discontinuo in x_0 : $\qquad \varphi'(x) \in \mathcal{C}^1$

$V(x) = \infty$ in x_0 : $\qquad \varphi(x_0) = 0$

$V(x) = \alpha\,\delta(x - x_0)$: $\qquad \varphi'(x_0^+) - \varphi(x_0^-) = \frac{2m\alpha}{\hbar^2}\varphi(x_0)$

2.3.2 Coefficienti di trasmissione e riflessione

$$T = \left|\frac{J_{trasm}}{J_{inc}}\right| \qquad R = \left|\frac{J_{rifl}}{J_{inc}}\right| \qquad \Longrightarrow \qquad T + R = 1$$

3 Operatori

3.1 Momenti angolare

$$\left[\hat{J}_i, \hat{J}_j\right] = i\hbar\epsilon_{ijk}\hat{J}_k$$

Per gli operatori che soddisfano questa algebra valgone queste proprietà:

$$\hat{J}^2 = \hat{J_x}^2 + \hat{J_y}^2 + \hat{J_z}^2 \qquad \Longrightarrow \qquad \left[\hat{J}^2, \hat{J}_i\right] = 0$$

Sono diagonalizzabili contemporaneamente con autovalori:

$$\begin{cases} \hat{J}^2\,|j,m\rangle = \hbar\,l(l+1)\,|j,m\rangle & \qquad l = \frac{n}{2}, n \in \mathbb{N} \\ \hat{J}_z\,|j,m\rangle = \hbar\,m\,|j,m\rangle & \qquad -l \geq m \leq l \text{ saltando di interi} \end{cases}$$

Operatore di innalzamento/abbassamento indici:

$$J_+ = J_x + iJ_y \qquad J_{=}J_x - iJ_y$$

Commutatori vari:

$$\left[J_z,\hat{}J_+,\hat{=}\right]\hbar\hat{J}_+ \qquad \left[J_z,\hat{}J_-,\hat{=}\right] - \hbar\hat{J}_-$$

Prodotti:

$$J_+J_- = J^2 - J_z^2 + \hbar J_z \qquad J_-J_+ = J^2 - J_z^2 - \hbar J_z$$

3.2 Momento angolare "orbitale"

$$L_x = -i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right)$$

$$L_y = -i\hbar\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right)$$

$$L_z = -i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)$$

Soddisfano il commutatore dei momenti angolari:

$$\left[\hat{L}_i, \hat{L_j}\right] = i\hbar\epsilon_{ijk}\hat{L_k}$$

Generica matrice di rotazione:

$$R_{xyz}(\alpha,\beta,\gamma) = \begin{pmatrix} \cos\alpha\cos\beta\cos\gamma - \sin\alpha\sin\gamma & \sin\alpha\cos\beta\cos\gamma + \cos\alpha\sin\gamma & -\sin\beta\cos\gamma \\ -\cos\alpha\cos\beta\sin\gamma & -\sin\alpha\cos\beta\sin\gamma + \cos\alpha\cos\gamma & \sin\beta\sin\gamma \\ \cos\alpha\sin\beta & \sin\alpha\sin\beta & \cos\beta \end{pmatrix}$$

Rotazione intorno all'asse z:

$$R_z(\alpha) = \begin{pmatrix} \cos\alpha & -\sin\alpha & 0 \\ \sin\alpha & \cos\alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

3.3 Spin

Spin $s = 1/2$:

$$S_z = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$\begin{cases} S_+ \left|-\right\rangle = \hbar \left|+\right\rangle \\ S_- \left|+\right\rangle = \hbar \left|-\right\rangle \end{cases} \implies S_+ = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad S_- = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \tag{1}$$

$$S_x = S_1 = \frac{S_+ + S_-}{2} = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \qquad \text{e} \qquad S_y = S_2 = \frac{S_+ - S_-}{2i} = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \tag{2}$$

Definendo le **matrici di Pauli**

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad , \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad , \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{3}$$

possiamo scrivere complessivamente

$$\boxed{S_i = \frac{\hbar}{2}\sigma_i} \tag{4}$$

Per lo spin in una direzione generica la matrice è:

$$\vec{S}\cdot\vec{n} = \begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta e^{-i\varphi} \\ \sin\theta e^{i\varphi} & \cos\theta \end{pmatrix}$$

Gli autovettori per i vari operatori di spin sono:

Operatore	Autovalore	Autostato
S_x	$\frac{\hbar}{2}$	$\left|+\right\rangle_x = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$
	$-\frac{\hbar}{2}$	$\left|-\right\rangle_x = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$
S_y	$\frac{\hbar}{2}$	$\left|+\right\rangle_y = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}$
	$-\frac{\hbar}{2}$	$\left|-\right\rangle_y = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix}$
S_z	$\frac{\hbar}{2}$	$\left|+\right\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$
	$-\frac{\hbar}{2}$	$\left|-\right\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$
S_n	$\frac{\hbar}{2}$	$\left|+\right\rangle_n = \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2}e^{-i\frac{\varphi}{2}} \\ \sin\frac{\theta}{2}e^{i\frac{\varphi}{2}} \end{pmatrix}$
	$-\frac{\hbar}{2}$	$\left|-\right\rangle_n = \begin{pmatrix} -\sin\frac{\theta}{2}e^{-i\frac{\varphi}{2}} \\ \cos\frac{\theta}{2}e^{i\frac{\varphi}{2}} \end{pmatrix}$

Operatori spin $s = 1$

$$S_- = \hbar\sqrt{2}\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \qquad \text{e} \qquad S_+ = \hbar\sqrt{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{5}$$

$$S_z = \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{6a}$$

$$S_x = \frac{S_+ + S_-}{2} = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \tag{6b}$$

$$S_y = \frac{S_+ - S_-}{2i} = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix} \tag{6c}$$

Autovalori e autostati per spin 1:

Operatore	Autovalore	Autostato
S_x	$\hbar$	$\|1,1\rangle_x = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 \\ \sqrt{2} \\ 1 \end{pmatrix}$
	0	$\|1,0\rangle_x = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}$
	$-\hbar$	$\|1,-1\rangle_x = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 \\ -\sqrt{2} \\ 1 \end{pmatrix}$
S_y	$\hbar$	$\|1,1\rangle_y = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 \\ i\sqrt{2} \\ -1 \end{pmatrix}$
	0	$\|1,0\rangle_y = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$
	$-\hbar$	$\|1,-1\rangle_y = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 \\ -i\sqrt{2} \\ -1 \end{pmatrix}$
S_z	$\hbar$	$\|1,1\rangle_z = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$
	0	$\|1,0\rangle_z = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$
	$-\hbar$	$\|1,-1\rangle_z = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$

Relazioni tra stati $|\pm,\pm\rangle$ di una coppia di elettroni, con gli stati di singoletto/tripletto:

$$\text{singoletto}: \quad \begin{cases} |0,0\rangle = \dfrac{|+,-\rangle - |-,+\rangle}{\sqrt{2}} \end{cases} \tag{7a}$$

$$\text{tripletto}: \quad \begin{cases} |1,1\rangle = |+,+\rangle \\ |1,0\rangle = \dfrac{|+,-\rangle + |-,+\rangle}{\sqrt{2}} \\ |1,-1\rangle = |-,-\rangle \end{cases} \tag{7b}$$

Cambi di base di per momento angolare con $l = 1$:

$$|1,1\rangle = \frac{|1,1\rangle_x + |1,-1\rangle_x + \sqrt{2}\ |1,0\rangle_x}{2} \tag{8a}$$

$$|1,0\rangle = \frac{|1,1\rangle_x - |1,-1\rangle_x}{\sqrt{2}} \tag{8b}$$

$$|1,-1\rangle = \frac{|1,1\rangle_x + |1,-1\rangle_x - \sqrt{2}\ |1,0\rangle_x}{2} \tag{8c}$$

$$|1,1\rangle = \frac{|1,1\rangle_y + |1,-1\rangle_y + \sqrt{2}\ |1,0\rangle_y}{2} \tag{9a}$$

$$|1,0\rangle = \frac{|1,1\rangle_y - |1,-1\rangle_y}{i\sqrt{2}} \tag{9b}$$

$$|1,-1\rangle = \frac{\sqrt{2}\ |1,0\rangle_y - |1,1\rangle_y - |1,-1\rangle_y}{2} \tag{9c}$$

4 Basi ortonormali varie

4.1 Polinomi di Legendre

$$\frac{d}{dx}\left[(1-x^2)\frac{d}{dx}P(x)\right] + n(n+1)P(x) = 0$$

La formula generale è:

$$P_n(x) = \frac{1}{(2^n n!)}\frac{d^n}{dx^n}\left[(x^2-1)^n\right]$$

e i primi polinomi sono:

$$P_0(x) = 1 \qquad P_1(x) = x \qquad P_2(x) = \frac{1}{2}(3x^2-1) \qquad P_3(x) = \frac{1}{2}(5x^3-3x)$$

$$P_4(x) = \frac{1}{8}(35x^4-30x^2+3) \qquad P_5(x) = \frac{1}{8}(63x^5-70x^3+15x) \qquad P_6(x) = \frac{1}{16}(231x^6-315x^4+105x^2-5)$$

Mentre le funzioni associati di Legendre (quelle che entrano nella armoniche sferiche) sono:

$$P_l^m(x) = (1-x^2)^{\frac{m}{2}}\frac{d^m}{dx^m}P_l(x)$$

4.2 Armoniche sferiche

$$Y_l^m(\theta,\varphi) = (-1)^{\frac{m+|m|}{2}}\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}\frac{(l-\mid m\mid)!}{(l+\mid m\mid)!}}P_l^m(\cos\theta)e^{im\varphi}$$