

Formulario di Meccanica Quantistica

24 novembre 2011

1 Parte I: matematica/principi

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 $P(x = x_0 + dx) = |\psi(x_0)|^2$.

1.1 Trasformata di Fourier in MQ

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

Proprietà:

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

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

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

Medie *m-esime* e “spread” data una funzione ampiezza di probabilità:

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

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

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

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 converger):

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

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 $\psi(x, t)$:

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

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

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

Inoltre si ricava che:

$$E \geq V_{min}$$

dove V_{min} è il minimo del potenziale.

2.2.1 Equazione di continuità

$$\frac{\partial |\psi|^2}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\psi} \nabla^2 \psi - \psi \nabla^2 \bar{\psi}) = 0$$

2.3 Problemi stazionari monodimensionali

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

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

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

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

2.3.1 Condizioni di raccordo

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

$$V(x) = \infty \text{ in } x_0 : \quad \varphi(x_0) = 0$$

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

2.3.2 Coefficienti di trasmissione e riflessione

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

3 Operatori

3.1 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:

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

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:

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

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:

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

e i primi polinomi sono:

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

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

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

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