

Formulario di Meccanica Quantistica

1 dicembre 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

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

Proprietà:

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

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

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

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 Momenti angolare

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

Per gli operatori che soddisfano questa algebra valgono queste proprietà:

$$\hat{J}^2 = \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + \hat{J}_z^2 \quad \implies \quad [\hat{J}^2, \hat{J}_i] = 0$$

Sono diagonalizzabili contemporaneamente con autovalori:

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

Operatore di innalzamento/abbassamento indici:

$$J_+ = J_x + iJ_y \quad J_- = J_x - iJ_y$$

Commutatori vari:

$$[J_z, \hat{J}_+, \hat{J}_+] = \hbar \hat{J}_+ \quad [J_z, \hat{J}_-, \hat{J}_-] = -\hbar \hat{J}_-$$

Prodotti:

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

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:

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

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:

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

3.3 Spin

Spin $s = 1/2$:

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

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

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

Definendo le **matrici di Pauli**

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

possiamo scrivere complessivamente

$$\boxed{S_i = \frac{\hbar}{2} \sigma_i} \quad (4)$$

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	$\frac{\hbar}{2}$	$ +\rangle_x = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$
	$-\frac{\hbar}{2}$	$ -\rangle_x = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$
S_y	$\frac{\hbar}{2}$	$ +\rangle_y = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}$
	$-\frac{\hbar}{2}$	$ -\rangle_y = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix}$
S_z	$\frac{\hbar}{2}$	$ +\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$
	$-\frac{\hbar}{2}$	$ -\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$
S_n	$\frac{\hbar}{2}$	$ +\rangle_n = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} e^{-i\frac{\varphi}{2}} \\ \sin \frac{\theta}{2} e^{i\frac{\varphi}{2}} \end{pmatrix}$
	$-\frac{\hbar}{2}$	$ -\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 $s = 1$

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

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

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

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

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:

$$\text{singoletto :} \quad \left\{ |0, 0\rangle = \frac{|+, -\rangle - |-, +\rangle}{\sqrt{2}} \right. \quad (7a)$$

$$\text{tripletto :} \quad \left\{ \begin{array}{l} |1, 1\rangle = |+, +\rangle \\ |1, 0\rangle = \frac{|+, -\rangle + |-, +\rangle}{\sqrt{2}} \\ |1, -1\rangle = |-, -\rangle \end{array} \right. \quad (7b)$$

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

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

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

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

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

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

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

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:

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

e i primi polinomi sono:

$$\begin{aligned} P_0(x) &= 1 & P_1(x) &= x & P_2(x) &= \frac{1}{2}(3x^2 - 1) & P_3(x) &= \frac{1}{2}(5x^3 - 3x) \\ P_4(x) &= \frac{1}{8}(35x^4 - 30x^2 + 3) & P_5(x) &= \frac{1}{8}(63x^5 - 70x^3 + 15x) & P_6(x) &= \frac{1}{16}(231x^6 - 315x^4 + 105x^2 - 5) \end{aligned}$$

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

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