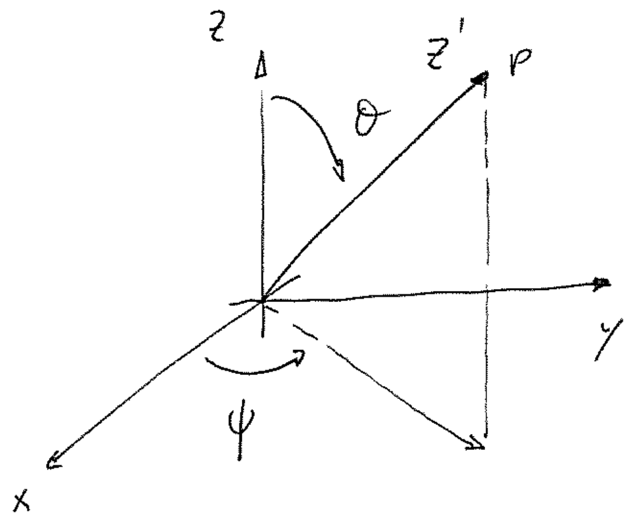
Le armoniche sferiche

Le armoniche sferiche



Le armoniche sferiche $Y_{\ell m}(\theta, \phi)$ sono delle funzioni utilizzate per risolvere l'equazione di Schrödinger per l'atomo d'idrogeno.

Sono autofunzioni dell'operatore $\hat{L}^2$ e $\hat{L}_z$ e soddisfano le equazioni

$$\begin{cases} \hat{L}^2 \, Y_{\ell m}(\theta, \phi) = \ell(\ell+1)\hbar^2 \, Y_{\ell m}(\theta, \phi) \\ \hat{L}_z \, Y_{\ell m}(\theta, \phi) = m\hbar \, Y_{\ell m}(\theta, \phi) \end{cases}$$

dove

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\phi^2} \right]$$

$$\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial\phi}$$

sono gli operatori momento angolare al quadrato $\hat{L}^2$ e componente z del momento angolare $\hat{L}_z$.

con $m = 0, \pm 1, \pm 2 \ldots \pm l$

Il calcolo delle armoniche sferiche viene fatto risolvendo le equazioni differenziali con una serie di polinomi detti polinomi di Legendre.

Tuttavia è possibile ricavarle attraverso un metodo alternativo che di seguito riportiamo.

Uno spinore possiede un momento angolare intrinseco detto spin $s = \frac{\hbar}{2}$.

Se si misura lo spin lungo l'asse z si possono ottenere due valori discreti : $|+\rangle$ (spin su pari a $\frac{\hbar}{2}$)

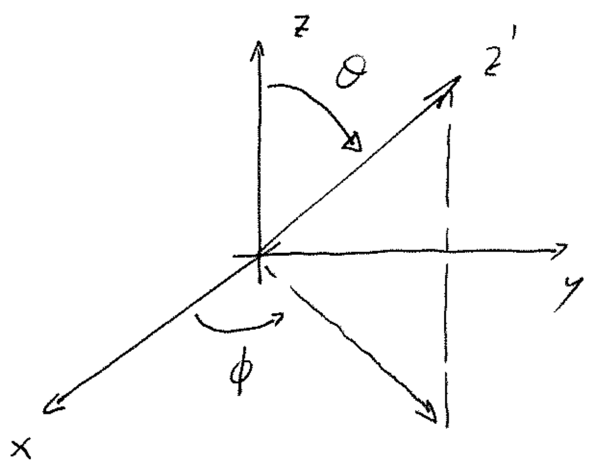
$|-\rangle$ (spin giù pari a $\frac{\hbar}{2}$)

Il momento massimo vale $L^2 = l(l+1)\hbar^2$

la componente lungo l'asse z $L_z = m\frac{\hbar}{2}$

con $m = \pm\frac{1}{2}$ $l = \frac{1}{2}$.

Se si considera una rotazione del sistema di



coordinate di un angolo θ intorno a y e di un angolo ϕ intorno a z possiamo scrivere la relazione che lega lo spin up e lo spin down $\begin{Bmatrix} |+\rangle \\ |-\rangle \end{Bmatrix}$ calcolato rispetto all'asse z nel sistema di coordinate x, y, z con lo spin up - spin down $\begin{Bmatrix} |+'\rangle \\ |-'\rangle \end{Bmatrix}$ calcolato rispetto all'asse z' nel sistema di riferimento x', y', z'.

$$\begin{Bmatrix} |+'\rangle \\ |-'\rangle \end{Bmatrix} = D(\theta, \phi) \begin{Bmatrix} |+\rangle \\ |-\rangle \end{Bmatrix}$$

$$D(\theta, \phi) = \left[\begin{array}{c|c} a & c \\ \hline b & d \end{array}\right] = \left[\begin{array}{c|c} \cos\frac{\theta}{2}\, e^{i\phi/2} & \sin\frac{\theta}{2} \\ \hline -\sin\frac{\theta}{2} & \cos\frac{\theta}{2}\, e^{-i\frac{\phi}{2}} \end{array}\right]$$

$$D(\theta, \phi) = \left[\begin{array}{c|c} \langle +', + \rangle & \langle +', - \rangle \\ \hline \langle -', + \rangle & \langle -', - \rangle \end{array}\right]$$

$a = \langle +' | + \rangle =$ ampiezza di probabilità che la particella con spin up in z ritrovi spin up in z'.

$c = \langle +' | - \rangle =$ ampiezza di probabilità che la particella con spin down in z ritrovi spin up in z'.

$b = \langle -' | + \rangle =$ ampiezza di probabilità che la particella con spin up in z ritrovi spin down in z'.

$d = \langle -' | - \rangle =$ ampiezza di probabilità che la particella con spin down in z ritrovi spin down in z'.

Consideriamo ora un sistema con momento angolare

$$L^2 = l(l+1)\hbar^2$$

$$L_z = m\hbar \qquad \begin{cases} \text{con } l=1 \\ m = 0; \pm 1 \end{cases}$$

Tale sistema può essere visto come formato da due spinori (questo artificio serve per calcolare la matrice di rotazione).

I due spinori possono presentarsi negli stati

$|+,+\rangle$ entrambe le particelle con spin up

$|-,-\rangle$ entrambe le particelle con spin down

$\frac{\sqrt{2}}{2}|+,-\rangle + \frac{\sqrt{2}}{2}|-,+\rangle$ una particella con spin up e una con spin down.

Valgono le relazioni di seguito riportate

$$|+',+'\rangle = a^2 |+,+\rangle + c^2 |-,-\rangle + ac |+,-\rangle + ac |-,+\rangle$$

$$|-',-'\rangle = b^2 |+,+\rangle + d^2 |-,-\rangle + db |+,-\rangle + db |-,+\rangle$$

$$\frac{\sqrt{2}}{2}\left(|+',-'\rangle + |-',+'\rangle\right) = \frac{\sqrt{2}}{2} ab |+,+\rangle + \frac{\sqrt{2}}{2} ab |+,+\rangle +$$

$$+ \frac{\sqrt{2}}{2} cd |-,-\rangle + \frac{\sqrt{2}}{2} cd |-,-\rangle + \frac{\sqrt{2}}{2} ad |+,-\rangle +$$

$$+ \frac{\sqrt{2}}{2} bc |+,-\rangle + \frac{\sqrt{2}}{2} ad |-,+\rangle + \frac{\sqrt{2}}{2} bc |-,+\rangle$$

Riscriviamo le relazioni cambiando notazione

$$|+,+\rangle = |l=1; m=1\rangle$$

$$\frac{\sqrt{2}}{2}\left(|+,-\rangle + |-,+\rangle\right) = |l=1, m=0\rangle$$

$$|-,-\rangle = |l=1, m=-1\rangle$$

$$|l'=1; m'=1\rangle = a^2\,|l=1; m=1\rangle + c^2\,|l=1; m=-1\rangle$$
$$+ \sqrt{2}\,ac\,|l=1; m=0\rangle$$

$$|l'=1; m'=0\rangle = \sqrt{2}\,ab\,|l=1; m=1\rangle + \sqrt{2}\,cd\,|l=1; m=-1\rangle$$
$$+ (ad+bc)\,|l=1; m=0\rangle$$

$$|l'=1; m=-1\rangle = b^2\,|l=1; m=1\rangle + d^2\,|l=1; m=-1\rangle$$
$$+ \sqrt{2}\,db\,|l=1; m=0\rangle$$

$$\left\{\begin{array}{c} |l'=1; m'=1\rangle \\ |l'=1; m'=0\rangle \\ |l'=1; m=-1\rangle \end{array}\right\} = \left[\begin{array}{c|c|c} a^2 & \sqrt{2}\,ac & c^2 \\ \hline \sqrt{2}\,ab & ad+bc & \sqrt{2}\,cd \\ \hline b^2 & \sqrt{2}\,bd & d^2 \end{array}\right] \left\{\begin{array}{c} |l=1; m=1\rangle \\ |l=1; m=0\rangle \\ |l=1; m=-1\rangle \end{array}\right\}$$

In modo analogo si possono costruire le matrici di rotazione per tutti i valori di l.

L'atomo di idrogeno si presenta con un certo momento angolare l.

Se il numero quantico del momento massimo lungo l'asse z è l, la componente lungo z può assumere valori $-l, -l+1, \ldots 0, \ldots -1+l, l$ e continueranno valere le proprietà e le matrici di rotazione che possono essere calcolate come in precedenza per ogni valore di l.

Supponiamo di voler conoscere l'ampiezza di probabilità di trovare l'elettrone lungo l'asse z. Un elettrone che si trova lungo l'asse z non può avere momento angolare lungo tale asse pertanto l'ampiezza di probabilità di trovare l'elettrone lungo tale asse sarà una

funzione solo radiale $F_\ell(r)$.

Consideriamo ora due rotazioni θ e ϕ che

portano l'asse z in posizione z'.

Il momento angolare lungo l'asse z' è diverso

da $\emptyset$ (ipotesi elettrone presente lungo l'asse z secondo

la funzione $F_\ell(r)$) e la probabilità di

trovarlo lungo questo asse vale

$$\langle l', m' \,|\, D(\theta,\phi) \,|\, l, m=0 \rangle \, F_\ell(r)$$ che

può essere scritta anche nella forma

$$Y(\theta,\phi)_{\ell m} \, F_\ell(r)$$

Da cui si ricava $Y(\theta,\phi)_{\ell m} = \langle l', m' \,|\, D(\theta,\phi) \,|\, l, m=0 \rangle$

Nel nostro caso abbiamo per

$\boxed{l'=1 \quad m'=1}$

$$Y(\theta,\phi)_{11} = \langle l'=1, m'=1 | D(\theta,\phi) | l=1, m=0 \rangle =$$

$$= \sqrt{2}\, ac$$

per

$\boxed{l'=1 \quad m'=0}$

$$Y(\theta,\phi)_{10} = \langle l'=1, m'=0 | D(\theta,\phi) | l=1, m=0 \rangle =$$

$$= ad + bc$$

per

$\boxed{l'=1 \quad m'=-1}$

$$Y(\theta,\phi)_{1-1} = \langle l'=1, m'=-1 | D(\theta,\phi) | l=1, m=0 \rangle =$$

$$= \sqrt{2}\, bd$$

$$\begin{cases} Y(\theta,\phi)_{11} = \sqrt{2}\, a c = \sqrt{2} \cos\frac{\theta}{2} \,\text{sen}\frac{\theta}{2}\, e^{i\frac{\phi}{2}} \\[2ex] Y(\theta,\phi)_{10} = a d + b c = \cos^2\frac{\theta}{2} - \text{sen}^2\frac{\theta}{2} \\[2ex] Y(\theta,\phi)_{1-1} = \sqrt{2}\, b d = -\sqrt{2}\,\text{sen}\frac{\theta}{2} \cos\frac{\theta}{2}\, e^{-i\frac{\phi}{2}} \end{cases}$$

$$\begin{cases} Y(\theta,\phi)_{11} = \frac{\sqrt{2}}{2}\, 2\cos\frac{\theta}{2}\,\text{sen}\frac{\theta}{2}\, e^{i\frac{\phi}{2}} = \frac{\sqrt{2}}{2}\,\text{sen}\,\theta\, e^{i\frac{\phi}{2}} \\[2ex] Y(\theta,\phi)_{10} = \cos^2\frac{\theta}{2} - 1 + \cos^2\frac{\theta}{2} = 2\cos^2\frac{\theta}{2} - 1 = \cos\theta \\[2ex] Y(\theta,\phi)_{1-1} = -\frac{\sqrt{2}}{2}\, 2\,\text{sen}\frac{\theta}{2}\cos\frac{\theta}{2}\, e^{-i\frac{\phi}{2}} = -\frac{\sqrt{2}}{2}\,\text{sen}\,\theta\, e^{-i\frac{\phi}{2}} \end{cases}$$

Sono le stesse armoniche ritrovate a meno di un fattore di normalizzazione e a meno di un segno dovuto al fatto di aver considerato la rotazione del sistema di coordinate e non della funzione d'onda.