

Meccanica Quantistica

Appunti personali sulla base del corso del professor K. Konishi
Università di Pisa
A.A. 2014-2015

Valerio Bertacchi

Note legali



Appunti di Meccanica Quantistica

è un'opera distribuita con Licenza Creative Commons
Attribuzione - Non commerciale - Condividi allo stesso modo 3.0 Italia.

Per visionare una copia completa della licenza, visita:

<http://creativecommons.org/licenses/by-nc-sa/3.0/it/legalcode>

Per sapere che diritti hai su quest'opera, visita:

<http://creativecommons.org/licenses/by-nc-sa/3.0/it/deed.it>

Liberatoria, aggiornamenti, segnalazione errori:

Quest'opera viene pubblicata in formato elettronico senza alcuna garanzia di correttezza del suo contenuto. Il documento, nella sua interezza, è opera di

Valerio Bertacchi

e viene mantenuto e aggiornato dallo stesso, a cui possono essere inviate (e sono gradite) eventuali segnalazioni di errori all'indirizzo email:

valerio.bertacchi@gmail.com

Ultimo aggiornamento: 4 febbraio 2015

Nota alla lettura

Questi appunti non sono pensati per essere utilizzati come primo testo di studio della materia: per essere consultati e utilizzati infatti necessitano una conoscenza preliminare dei concetti studiati. Questi appunti si configurano quindi come qualcosa di più di un *formulario* o di un insieme di schemi, ma sicuramente come qualcosa di meno degli appunti delle lezioni corso, o almeno come qualcosa di diverso. Personalmente questo documento ricalca quelli che sono i miei personali appunti opportunamente sistemati e schematizzati mettendo insieme appunti presi a lezione con materiale proveniente da libri di testo. Ho sempre trovato utili tali appunti come formulario da utilizzare durante un esame scritto o nella preparazione dell'orale.

In quest'ottica sono state omesse tutte le *dimostrazioni* e riportati solo i passaggi logici essenziali a comprendere il senso di un'asserzione: esistono sicuramente altri testi che contengono tutte le dimostrazioni di ogni enunciato qui riportato, scritte sicuramente meglio di come avrei potuto fare io.

Per mantenere sempre una *struttura schematica* e di rapida e precisa consultazione si tende quasi sempre ad utilizzare un linguaggio simbolico-matematico e quasi mai discorsivo, nonostante talvolta questo appesantisca un po' la lettura.

Per evitare di dover specificare la notazione utilizzata ogni volta si utilizza una *notazione unica* in tutto il documento (identica anche a quella di tutti gli altri documenti di appunti scritti da me), non sempre quindi la notazione è quella più comunemente utilizzata, ma è invece scelta in modo da essere univoca. Alcune rare volte ciò è stato impossibile (data la vastità degli argomenti trattati), in tal caso la notazione è dichiarata esplicitamente dove necessario.

Pisa, 7 gennaio 2015

Indice

Note Legali	1
Liberatoria, aggiornamenti, segnalazione errori	1
Nota alla lettura	1
Notazioni	3
1 Criticità della Meccanica Classica	5
2 Principi della Meccanica Quantistica	7
2.1 1° Postulato: Stato Quantistico	7
2.2 2° Postulato: Osservabili (variabili dinamiche)	7
2.3 3° Postulato: Probabilità di un risultato	8
2.4 4° Postulato: Collasso della Funzione d'Onda	8
2.5 Operatori fondamentali	9
2.6 5° Postulato: Evoluzione Temporale	9
2.7 Spettro Continuo	10
2.8 Delta di Dirac	11
3 Equazione di Schrödinger monodimensionale	12
3.1 Particella Libera	12
3.2 Buca di potenziale infinitamente alta	12
3.3 Buca di potenziale di altezza finita	13
3.4 Oscillatore Armonico	13
3.5 Operatori di Creazione Distruzione - Seconda Quantizzazione	14
3.6 Buca δ	15
3.7 Spettro Continuo	15
4 Rappresentazioni	18
4.1 Struttura Matematica	18
4.2 Schema di Heisenberg	20
4.3 Stati Misti	20
4.4 Simmetrie	21
5 Momento Angolare	23
5.1 Spin	25
5.2 Rotazioni	27
6 Equazione di Schrödinger tridimensionale	28
6.1 Soluzione Radiale libera (Onde Sferiche)	28
6.2 Stati legati buca tridimensionale	29
6.3 Atomo di Idrogeno	30
6.4 Oscillatore Armonico Tridimensionale	30
7 Algoritmi Risolutivi	32

Notazioni

l : lunghezza
 S : superficie
 V : volume
 Ω : angolo solido
 θ : angolo azimutale
 φ : angolo

ρ : densità volumica (dipendente dal contesto)
 σ : densità superficiale (dipendente dal contesto)
 λ : densità lineare (dipendente dal contesto)

$\mathcal{L}$: lagrangiana
 $\mathcal{H}$: hamiltoniana
 $\mathcal{L}$: densità di lagrangiana
 $\mathbf{q}$: coordinata canonica di posizione
 $\mathbf{p}$: momento canonico coniugato

$\mathbf{r}, (r, \theta, \phi)$: vettore posizione e coordinate di posizione sferiche
 $\mathbf{x}, (x, y, z)$: vettore posizione e coordinate di posizione cartesiane
 $\mathbf{r}, (r, \theta, z)$: vettore posizione e coordinate di posizione cilindriche
 $\mathbf{v}$: velocità
 ω : velocità angolare / pulsazione
 $\mathbf{a}$: accelerazione
 α : accelerazione angolare
 R : raggio

t : tempo
 m : massa
 E : enegia
 u : densità di energia
 $\mathcal{P}$: potenza
 U : energia potenziale
 E_k : enegia cinetica
 W : lavoro
 $\mathbf{p}$: quantita di moto (o momento canonico)
 $\mathbf{F}$: forza
 $\mathbf{L}$: momento angolare
 $\mathbf{M}$: momento della forza
 P : pressione
 Ω : vorticità

Q : carica elettrica
 I : corrente elettrica
 $\mathbf{J}$: densità di corrente
 V : potenziale elettrico
 $\mathbf{A}$: potenziale vettore
 $\mathbf{E}$: campo elettrico
 $\mathbf{B}$: campo di induzione magnetica
 $\mathbf{D}$: campo di spostamento elettrico
 $\mathbf{H}$: campo magnetico
 $\mathbf{S}$: vettore di Poynting
 $\mathbf{k}$: vettore d'onda

λ : lunghezza d'onda
 ν : frequenza
 σ_c : conducibilità elettrica
 ρ_c : resistività elettrica
 R : resistenza elettrica
 C : capacità elettrica
 L : autoinduttanza
 M : mutua induttanza

T : temperatura
 S : entropia
 Z : funzione di partizione
 C : capacità termica
 c_v : calore specifico volumico
 c_n : calore specifico molare
 U : energia interna
 H : entalpia
 G : energia libera di Gibbs
 F : energia libera di Helmholtz
 β : beta termodinamica
 η : rendimento

$(1eV = 1.602 \cdot 10^{-19} J)$
 $h = 6.62 \cdot 10^{-34} J \cdot s$: costante di Plack
 $\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1.05410^{-34} J \cdot s$: costante di Plank ridotta
 $c = 2.99 \cdot 10^8 m/s$: velocità della luce
 $G = 6,67 \cdot 10^{-11} \frac{m^3}{kg \cdot s^2}$: costante di gravitazione universale
 $\varepsilon_0 = 8.85 \cdot 10^{-12} N \cdot m^2 / C^2$: costante dielettrica del vuoto
 $\mu_0 = 1.25 \cdot 10^{-6} \frac{m \cdot kg}{s^2 \cdot A^2}$: permeabilità magnetica del vuoto
 $g = 9.80 m/s^2$: accelerazione di gravità (sulla superficie della Terra)
 $k_b = 1.38 \cdot 10^{-23} J/K$: costante di Boltzmann
 $e = -1.602 \cdot 10^{-19} C$: carica dell'elettrone
 $m_e = 9.10 \cdot 10^{-31} kg$: massa dell'elettrone (0.511 MeV/c²)
 $m_p = 1.67 \cdot 10^{-27} kg$: massa del protone (938.27 MeV/c²)
 $\alpha = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0\hbar c} = 7.30 \cdot 10^{-3} \simeq \frac{1}{137}$: costante di struttra fine

1 Criticità della Meccanica Classica

DIFFRAZIONE E INTERFERENZA:

(Esperimento di Tonomura) Fascio di elettroni fatto passare attraverso reticolo di diffrazione genera figura di diffrazione, bassa intensità ed alta velocità $\Rightarrow$ elettroni isolati $\Rightarrow$ singolo elettrone presenta fenomeni ondulatori (proprietà /textitduali della particella)

DE BROGLIE:

$\lambda = h/|p|$ lunghezza d'onda associata ad una particella con impulso $\mathbf{p}$

$|p| = h/\lambda$ impulso associato alla particella rappresentante l'onda con lunghezza d'onda λ

STABILITÀ DELL'ATOMO:

Modello planetario dell'atomo $\Rightarrow \mathcal{H} = \frac{p^2}{2m} - \frac{q^2}{r}$ con $m \simeq m_e \Rightarrow a \neq 0 \forall t \Rightarrow \mathcal{P}_{\text{irraggiata}} \neq 0$
 $\Rightarrow e^-$ collassa sul nucleo in 10^{-10} secondi

IDENTITÀ DEGLI ATOMI:

Modello planetario dell'atomo $\Rightarrow R_{\text{atomo}}$ dipende da condizioni iniziali (processo di formazione) $\Rightarrow$ ogni atomo ha un raggio diverso

Impossibile costruire una grandezza costante delle dimensioni di una lunghezza che rappresenti R_{atomo} con le grandezze e le costanti in gioco (m, q) $\Rightarrow$ introdotta h $|[h] = [rp] \Rightarrow$ costruito *Raggio di Bohr*: $R_b = \frac{\hbar^2}{me^2}$

EFFETTO TUNNEL

Elettrone (o altra particella) risulta in grado di superare barriere di potenziali $|U_{\text{barriera}} > E_{e^-}$

Segnale (onda) risulta in grado di attraversare, e non solo aggirare, barriere schermanti

TEORIA DEL CALORE SPECIFICO:

CALORE SPECIFICO: $C = \frac{\partial U}{\partial T}$

PROBABILITÀ: $p_i = \frac{1}{Z} e^{-\beta H_i}$ che il sistema si trovi nel microstato i

FUNZIONE DI PARTIZIONE: $Z = \frac{1}{h^{3N} N!} \int_{\Delta\Gamma} e^{-\beta H} dp dq$

EQUIPARTIZIONE DELL'ENERGIA: $U = n \frac{1}{2} k_b T$ con n = numero gradi di libertà quadratici in p o q

CALORE SPECIFICO GAS MONOATOMICI: $C = \frac{3}{2} k_b N = \frac{3}{2} R$

CALORE SPECIFICO GAS BIATOMICI: $C = \frac{5}{2} k_b N = \frac{5}{2} R$

CALORE SPECIFICO SOLIDI (LEGGE DI DULONG-PETIT) : $C = 3 k_b N = 3R$

Tali risultati risultano sperimentalmente validi solo ad alte temperature, mentre a basse temperature $C \rightarrow 0$, come se alcuni gradi di libertà si "cogelassero"

RADIAZIONE DI CORPO NERO:

CORPO NERO:

Corpo che assorbe tutta la radiazione incidente, $\forall$ frequenza (Potere Assorbente= 1) e la reirraggia completamente (emissività $\varepsilon = 1$), riflessione e trasmissione nulla.

ENERGIA TOTALE IRRAGGIATA:

SPERIMENTALE (LEGGE DI STEFAN BOLTZMANN)

$$I = \sigma T^4 \text{ con } \sigma = \text{costante di Stefan Boltzmann}$$

DA EQUIPARTIZIONE

$U = n K_b T = \infty$ $C = \infty$ dati gli infiniti gradi di libertà (frequenze sulle due polarizzazioni) di un'onda elettromagnetica, $\nexists$ frequenza massima.

DENSITÀ DI ENERGIA IRRAGGIATA SULLO SPETTRO DELLE FREQUENZE:

FORMULA DI REYLEIGH JEANS: $u(\nu) d\nu = \frac{8\pi k_b T}{c^3} \nu^2 d\nu$ (valida a basse frequenze)

LEGGE DI SCALING: $u(\nu) d\nu = \frac{8\pi\nu}{c^3} F\left(\frac{\nu}{T}\right) \nu^2 d\nu$

FORMULA DI WIEN: $F(x) = k_b \beta e^{-\beta x} \Rightarrow u(\nu) d\nu = \frac{8\pi h \nu}{c^3} e^{-\frac{h\nu}{k_b T}} \nu^2 d\nu$ (valida ad alte frequenze)

LEGGE DI PLANCK:

$$u(\nu)d\nu = \frac{8\pi}{c^3} \frac{h\nu}{e^{\frac{h\nu}{k_b T}} - 1} \nu^2 d\nu \quad (\text{valida } \forall \nu, \text{ usato il } \textit{Quanto di Energia: } E = h\nu = pc) \quad (1)$$

EFFETTO FOTOELETTRICO

Sperimentalmente, un metallo investito da radiazione (raggi x) emette e^- :

Osservazioni sperimentali:

ENERGIA e^- : dipendente da ν incidente, indipendente da intensità

INTENSITÀ CORRENTE (NUMERO e^-): dipendente da intensità della luce incidente

TEMPISTICA: e^- emessi immediatamente dopo illuminazione

Nuove ipotesi:

ENERGIA: $E_\gamma = h\nu - A$ (A dipende dalla sostanza) $\Rightarrow$ luce è flusso di fotoni

INTENSITÀ: e^- assorbe un γ alla volta $\Rightarrow$ singolo γ deve avere $E(\nu)$ sufficiente per eccitarlo

SPETTRI ATOMICI

Sperimentalmente gli spettri atomici risultano discreti, presentano linee che caratterizzano l'elemento

BALMER: formula empirica $\lambda = \frac{n^2}{n^2-4}\lambda_0$ $\lambda_0 = 3645.6$ $n \in \mathbb{N}$

RYDBERG: formula empirica $\nu(n_2, n_1) = T_2(n_2) - T_1(n_1)$ serie spettrale (fissando un n)

RICOMBINAZIONE DI RALEYIGH-RITZ: formula empirica $\nu(n_3, n_1) = \nu(n_3, n_2) + \nu(n_2, n_1)$

METALLI ALCALINI $\frac{\nu}{c} = \frac{1}{\lambda} = \frac{\mathcal{R}}{(m+a)^2} - \frac{\mathcal{R}}{(m+b)^2}$ con $\mathcal{R}$ = costante di Rydberg

ATOMO DI BOHR

Ipotesi di quantizzazione:

QUANTIZZAZIONE ENERGIA: E_{e^-} quantizzata

STATI STAZIONARI: $\exists E_i$ livelli energetici stazionari: se e^- in tali stati l'atomo non emette luce

SALTI QUANTICI: atomo emette o assorbe un fotone $\gamma \mid E_\gamma = h\nu = E_n - E_m$ con E_i livelli energetici

ELETTRONE CLASSICO: se e^- in stato stazionario $\Rightarrow$ comportamento classico

PRINCIPIO DI CORRISPONDENZA: se $n \gg 1 \Rightarrow$ risultati classici $\simeq$ risultati quantistici

Giustificazione quantistica:

QUANTIZZAZIONE ENERGIA: da H coulombiana

STATI STAZIONARI: da probabilità di emissione γ , con $\mathcal{P}_{\text{emissione}}(|0\rangle) = 0$

SALTI QUANTICI: da interazione con campo elettromagnetico

Risultati:

(validi su Idrogeno, combinando ipotesi classiche e quantistiche)

ENERGIA LIVELLI: $E_n = \frac{\mathcal{R}hc}{n^2}$

COSTANTE DI RYDBERG: $\mathcal{R} = \frac{2\pi^2 me^4}{ch^3}$

RAGGIO DI BOHR: $R_b = \frac{h^2}{me^2}$

QUANTIZZAZIONE DI BOHR - SOMMERFELD:

QUANTIZZAZIONE: $\oint pdq = nh$ $n \in \mathbb{N}$ con p, q canonicamente coniugate

LIMITI: moti quasi-periodici (invariante adiabatico)

2 Principi della Meccanica Quantistica

2.1 1° Postulato: Stato Quantistico

$\forall$ sistema fisico è associato H spazio di Hilbert separabile

$\forall$ stato del sistema è associato un vettore (una direzione) $\psi \in H$ detto Funzione d'Onda

FUNZIONE D'ONDA:

Stato quantistico del sistema completamente descritto (massima informazione ricavabile) da $\psi(\{q\}, t)$

PROBABILITÀ: $\mathcal{P} \mid$ sistema $\in [q, q + dq] : d\mathcal{P} = |\psi(\{q\}, t)|^2 dq$

SISTEMI NON-INTERAGENTI: A, B sistemi scorrelati $\Rightarrow \psi_{A,B} = \psi_A \psi_B$ (la funzione d'onda fattorizza)

ENTANGLEMENT: due sistemi che hanno interagito nel passato mantengono correlazione anche se vengono separate da intervallo di genere spazio

NORMALIZZAZIONE:

A MENO DI C: $\forall c \neq 0, c < \infty \Rightarrow \psi$ e $c\psi$ rappresentano lo stesso stato (predizioni indistinguibili)

NORMALIZZARE : individuata $c \mid \int |c\psi(q, t)|^2 = \|c\psi\|^2 = 1 \Rightarrow c\psi$ è uno stato quantistico normalizzato

NORMALIZZABILE : $\int |\psi(q, t)|^2 < \infty \Leftrightarrow \psi$ è normalizzabile, ψ rappresenta uno stato fisico (legato)

PRINCIPIO DI SOVRAPPOSIZIONE:

ψ_1, ψ_2 stati quantistici possibili $\Rightarrow c_1\psi_1 + c_2\psi_2$ è stato quantistico $\forall c_1, c_2 \mid |c_1|^2 + |c_2|^2 \neq 0$

STRUTTURA MATEMATICA:

SPAZIO DI HILBERT $\mathbb{L}^2$: ψ stato quantistico $\Rightarrow \int |\psi(q, t)|^2 < \infty \Leftrightarrow \psi \in \mathbb{L}^2$

PRODOTTO SCALARE: $\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle = \int \psi_1^* \psi_2 dq = \langle \psi_2 | \psi_1 \rangle^*$

NORMA: $\|\psi\|^2 = \int |\psi(q, t)|^2 = \langle \psi_1 | \psi_1 \rangle$

NOTAZIONE DI DIRAC:

BRACKET: KET: $|\psi\rangle \equiv \psi$ BRA: $\langle\psi| \equiv \psi^*$

AUTOSTATI: $|n\rangle \equiv |\psi_n\rangle \quad \langle n| \equiv \langle\psi_n|$

2.2 2° Postulato: Osservabili (variabili dinamiche)

$\forall F$ variabile dinamica è associato operatore lineare $\hat{F}$ Hermitiano su H

OPERATORE HERMITIANO

TRASPOSTO: $\hat{F}^T \mid \forall \phi, \psi \in H \quad \int \hat{F} \phi^* \psi dq = \int \phi^* \hat{F}^T \psi dq$

CONIUGATO HERMITIANO (AGGIUNTO): $\hat{F}^\dagger \equiv (\hat{F}^T)^* = (\hat{F}^*)^T$

OPERATORE HERMITIANO (AUTOAGGIUNTO): $\hat{F} \mid \hat{F}^\dagger = \hat{F}$

AUTOSTATI:

$\hat{F}\psi_n = f_n\psi_n \Rightarrow \psi_n$ è un'autofunzione che rappresenta un *autostato* di $\hat{F}$ relativo all'*autovalore* f_n

ORTONORMALITÀ: Autostati relativi ad autovalori distinti sono ortonormali: $\langle \psi_n | \psi_m \rangle = \delta_{nm}$

COMPLETEZZA: $\sum_n \psi_n(q) \psi_n^*(q') = \delta(q - q') \Rightarrow \psi$ esprimibile come combinazione di autostati

SPETTRO:

$\hat{F}$ lineare $\Rightarrow \hat{F}$ rappresentabile in forma matriciale attraverso una base di H

$\hat{F}$ hermitiano $\Leftrightarrow$ spettro di $\hat{F} \in \mathbb{R}$ e $\exists$ base di autofunzioni $\mid \psi(q) = \sum_i c_i \psi_i(q)$

COMPOSIZIONE DI OPERATORI:

$\hat{F}\hat{G}\psi = \hat{F}(\hat{G}\psi)$

COMMUTATORE:

$$\text{COMMUTATORE: } [\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$$

$$\text{ANNULLAMENTO: } [\hat{A}, \hat{B}] = 0 \Rightarrow \hat{A} \text{ e } \hat{B} \text{ commutano}$$

$$\text{BILINEARITÀ: } [A, B + C] = [A, B] + [A, C] \quad [A + B, C] = [A, C] + [B, C]$$

$$\text{ANTICOMMUTATIVITÀ: } [A, B] = -[B, A] \quad [A, A] = 0$$

$$\text{IDENTITÀ DI JACOBI: } [A, [B, C]] + [B, [C, A]] + [C, [A, B]] = 0$$

$$\text{REGOLA DI LEIBNITZ (PRODOTTO): } [A, BC] = [A, B]C + B[A, C] \quad [AB, C] = [A, B]C + B[A, C]$$

$$\text{ANTICOMMUTATORE: } \{A, B\} = AB + BA$$

OSSERVABILI COMPATIBILI

$\hat{F}, \hat{G}$ compatibili $\Rightarrow [\hat{F}, \hat{G}] = 0 \Rightarrow \exists$ una base di autostati ortonormali $\{\psi_n\}$ che diagonalizza simultaneamente i due operatori, cioè: $\hat{F}\psi_n = f_n\psi_n$; $\hat{G}\psi_n = g_n\psi_n \quad \forall n$

Se due osservabili sono compatibili possono avere simultaneamente valori definiti in una misura

PRINCIPIO DI INDETERMINAZIONE DI HEISENBERG:

Determinazione simultanea di due osservabili canonicamente coniugate (o comunque $[\hat{F}, \hat{G}] \neq 0$) ha un'incertezza intrinseca minima:

$$\Delta F \Delta G \geq \frac{1}{2} \hbar \quad (2)$$

2.3 3° Postulato: Probabilità di un risultato

Sistema nello stato $\psi = \sum_i c_i \psi_i(q) \Rightarrow$ la probabilità di ottenere da una misura di F il risultato f_n è $\mathcal{P}_n = |c_n|^2$

CONDIZIONE DI NORMALIZZAZIONE:

Funzione d'onda rappresenta una distribuzione di probabilità $\Rightarrow \|\psi\|^2 = 1 = \int |\psi| dq$ equivale a $\mathcal{P}_{\text{tot}} = 1$

STATO NON NORMALIZZATO:

$$\text{Se } \|\psi\| \neq 1 \Rightarrow \mathcal{P}_n = \frac{|c_n|^2}{\sum_i |c_i|^2}$$

MEDIA QUANTISTICA (VALORE DI ASPETTAZIONE):

Valor medio dell'operatore $\hat{F}$ sullo stato: ψ :

$$\langle \hat{F} \rangle = \langle \psi | \hat{F} | \psi \rangle = \int \psi^*(q) \hat{F} \psi(q) dq = \sum_i |c_i|^2 f_i = \sum_i \mathcal{P}_i f_i \quad (3)$$

$$\text{REALE: } \langle \hat{F} \rangle \in \mathbb{R} \quad (\text{essendo } f_n \in \mathbb{R} \quad \forall n)$$

DISPERSIONE:

$$\Delta F = \sqrt{\langle (F - \langle F \rangle)^2 \rangle}$$

PROBABILITÀ IN FUNZIONE DELL'AUTOSTATO:

$$\text{Probabilità di ottenere } f_n: \mathcal{P}_n = |\langle \psi_n | \psi \rangle|^2$$

2.4 4° Postulato: Collasso della Funzione d'Onda

Misura di F e ottenimento del risultato f_n determina con certezza ($\mathcal{P} = 1$) stato del sistema nell'autostato ψ_n

OPERATORE DI PROIEZIONE (MISURA):

$$\Pi_{\psi_n} \equiv |\psi_n\rangle \langle \psi_n| \Leftrightarrow \langle \Pi_{\psi_n}(\psi) \rangle = \langle \psi | \psi_n \rangle \cdot \langle \psi_n | \psi \rangle \Leftrightarrow$$

Proietta la funzione d'onda ψ sull'autospazio relativo a ψ_n .

Rappresenta la probabilità di ottenere ψ_n misurando ψ

$$\Pi_{\psi_n} = |\psi_n\rangle \langle \psi_n| \otimes \langle \psi_n | = \psi \cdot \psi^\dagger \quad (\text{tutte le combinazioni possibili tra il vettore e il trasposto coniugato})$$

OSSERVABILI MASSIMALI:

Insieme di osservabili tutti compatibili che caratterizzano completamente e simultaneamente lo stato ψ
 $\forall \psi \exists$ un insieme di osservabili massimali, ma tale insieme non è univoco

ELEMENTI DI MATRICE DI UN OPERATORE:

$$\hat{F}_{nm} = \langle n|F|m\rangle = \int \psi_n(x)^* \hat{F} \psi_m(x) dx \quad (\text{Dipendono dalla base } \psi_n)$$

VALOR MEDIO PRODOTTO OPERATORI:

$$\langle \psi|AB|\psi\rangle = \sum_i \langle \psi|A|i\rangle \langle i|B|\psi\rangle$$

$$\text{analogamente: } \langle \psi|ABC\dots Z|\psi\rangle = \sum_i \sum_j \dots \sum_z \langle \psi|A|i\rangle \langle i|B|j\rangle \langle j|C|k\rangle \langle k|\dots|z\rangle \langle z|Z|\psi\rangle$$

se noti elementi di matrice singoli operatori $\Rightarrow$ individuazione elementi non nulli $\Rightarrow$ somme eseguibili

2.5 Operatori fondamentali**POSIZIONE:**

$$\hat{\mathbf{q}} = \mathbf{q}$$

$$\text{AUTOSTATI (IMPROPRI): } \psi_{\mathbf{q}_0}(\mathbf{q}) = \delta^3(\mathbf{q} - \mathbf{q}_0) \quad \text{soddisfacenti} \quad \hat{\mathbf{q}}\psi_{\mathbf{q}_0}(\mathbf{q}) = \mathbf{q}_0\psi_{\mathbf{q}_0}(\mathbf{q})$$

IMPULSO:

$$\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla \quad (\text{Monodimensionale: } \hat{p} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial q})$$

$$\text{AUTOSTATI (IMPROPRI): } \psi_{\mathbf{p}_0}(\mathbf{q}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{\frac{i\mathbf{p}_0\cdot\mathbf{r}}{\hbar}} \quad \text{soddisfacenti} \quad \hat{\mathbf{p}}\psi_{\mathbf{p}_0} = \mathbf{p}_0\psi_{\mathbf{p}_0}$$

$$\text{SVILUPPO NEGLI AUTOSTATI: } \psi(\mathbf{x}, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \hat{\psi}(p, t) e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar} \\ \hat{\psi}(p, t) = \int \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{-i\mathbf{p}_0\cdot\mathbf{x}/\hbar} \psi(\mathbf{x}, t) d\mathbf{x} = \mathcal{F}(\psi(\mathbf{x}, t))$$

$$\text{TRASLAZIONE SPAZIALE: } \hat{F}(\mathbf{q} + \mathbf{q}_0, \mathbf{p}) = e^{\frac{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}_0}{\hbar}} \hat{F}(\mathbf{q}, \mathbf{p}) e^{-\frac{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}_0}{\hbar}}$$

$$\text{CONSERVAZIONE: } \frac{d\hat{p}_i}{dt} = 0 \Leftrightarrow [\hat{p}_i, \hat{H}] \Leftrightarrow \text{ sistema invariante per traslazioni spaziali sull'asse } i$$

$$\text{VALORE DI ASPETTAZIONE: } \psi \in \mathbb{R} \Rightarrow \langle \hat{p} \rangle = 0 \quad (\text{a media nulla})$$

COMMUTATORE FONDAMENTALE:

$$[\hat{q}, \hat{p}] = i\hbar$$

$$\text{Particella in 3 dimensioni: } [\hat{q}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\delta_{ij} \quad [\hat{q}_i, \hat{q}_j] = [\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0$$

2.6 5° Postulato: Evoluzione Temporale**HAMILTONIANA:**

$$\hat{H}(\hat{q}, \hat{p}, t) = \text{energia del sistema, operatore lineare}$$

$$\langle \hat{H} \rangle = \text{energia media del sistema}$$

$$\hat{H}(\hat{q}, \hat{p}, t) = H(q, p, t)|_{q=\hat{q}; p=\hat{p}} \quad \text{dove } H = \text{hamiltoniana classica (maggioranza dei casi)}$$

$$\text{TRASLAZIONE TEMPORALE: } \hat{H} \rightarrow i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$$

EQUAZIONE DI SCHRÖDINGER:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(q, t) = \hat{H}(\hat{q}, \hat{p}, t)\psi(q, t) \quad (4)$$

$$\text{EQUAZIONE INDIPENDENTE DAL TEMPO: } \hat{H}(\hat{q}, \hat{p})\psi_n(q, t) = E_n\psi_n(q, t)$$

$$\text{AUTOVALORI: } E_n = \text{energie misurabili del sistema. Costanti: } \frac{dE_n}{dt} = 0$$

$$\text{STATI STAZIONARI: } \psi_n(t) = e^{-iE_nt/\hbar}\psi_n(0) \Rightarrow \forall \hat{F} \mid \frac{d\hat{F}}{dt} = 0 \quad \langle \psi_n(t) \mid \hat{F} \mid \psi_n(t) \rangle = \langle \psi_n(0) \mid \hat{F} \mid \psi_n(0) \rangle$$

$$\text{SOLUZIONE GENERALE: } \psi(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}H(t)}\psi(0)$$

$$\text{IN AUTOSTATI: } \psi(t) = \sum_n a_n e^{-iE_nt/\hbar}\psi_n(0) \quad a_n = \langle \psi_n \mid \psi(0) \rangle \quad \psi(0) = \sum_n a_n \psi_n(0) \quad (\text{cond iniziali})$$

$$\text{POTENZIALE: dato } V(r) \Rightarrow E_n > V_{\min} \forall n$$

EQUAZIONE DI CONTINUITÀ:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \mathbf{j} = 0$$

DENSITÀ DI PROBABILITÀ: $\rho \equiv |\psi(\mathbf{r})|^2$

DENSITÀ DI CORRENTE (FLUSSO DI PROBABILITÀ): $\mathbf{j} \equiv \frac{i\hbar}{2m}((\nabla\psi^*)\psi - \psi^*\nabla\psi)$
(interpretabile come "il numero particelle di che attraversa ds in dt ")

EVOLUZIONE TEMPORALE VALOR MEDIO:

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{F} \rangle_\psi = \langle \psi | \frac{\partial \hat{F}}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar} [\hat{F}, \hat{H}] | \psi \rangle$$

COSTANTI DEL MOTO:

$$[\hat{F}, \hat{H}] = 0 \text{ con } \frac{\partial \hat{F}}{\partial t} = 0 \text{ (non dipende esplicitamente da } t) \Rightarrow \frac{d\hat{F}}{dt} = 0$$

$$F, G \text{ costanti, } \frac{\partial \hat{F}}{\partial t} = \frac{\partial \hat{G}}{\partial t} = 0 \Rightarrow [\hat{F}, \hat{G}] \text{ costante}$$

CONDIZIONI DI REGOLARITÀ:

ψ è imposto continuo per qualsiasi V per consistenza (è densità di probabilità)
(da Schrödinger) $\nabla\psi$ risulta continuo $\forall x | V(x) < \infty$ (o meglio se le eventuali discontinuità sono finite)

TEOREMA DI EHRENFEST

$$\psi \text{ pacchetto d'onda: } \frac{d}{dt} \langle m\mathbf{r} \rangle = \langle \mathbf{p} \rangle \quad \frac{d}{dt} \langle \mathbf{p} \rangle = -\langle \nabla V \rangle$$

Ma ψ NON rappresenta la distribuzione materiale di una particella (solo distribuzione di probabilità)

TEOREMA DEL VIRIALE:

$$\psi_n \text{ stazionario: } 2 \langle \psi_n | \frac{\mathbf{p}^2}{2m} | \psi_n \rangle = \langle \psi_n | \mathbf{r} \cdot \nabla V | \psi_n \rangle$$

TEOREMA DI FEYNMANN-HELLMAN:

$$H = H_0 + V(\mathbf{r}, g_i) \text{ con } g_i \text{ parametri esterni, anche lentamente variabili} \Rightarrow H\psi_n(g) = E_n(g)\psi_n(g) :$$

$$\frac{\partial E_n}{\partial g} = \left\langle \frac{\partial V}{\partial g} \right\rangle_n$$

2.7 Spettro Continuo

AUTOSTATI:

$$\hat{F}\psi_f(q) = f\psi_f(q) \text{ con } f \text{ che assume valori continui}$$

$$\text{ORTONORMALITÀ: } \int \psi_f^*(q)\psi_{f'}(q)dq = \delta(f - f')$$

$$\text{COMPLETEZZA: } \int \psi_f(q)\psi_f^*(q')dq = \delta(q - q')$$

PROBABILITÀ:

$$\psi(q) = \int a(f)\psi_f(q)df \Rightarrow d\mathcal{P} = |a(f)|^2 df$$

$$\text{NORMALIZZAZIONE: } \int |a(f)|^2 df = 1$$

$$\text{PROBABILITÀ IN FUNZIONE DELL'AUTOSTATO: } a(f) = \langle \psi_f | \psi \rangle$$

SISTEMI MISTI:

Esistono sistemi con autovalori discreti (*propri*) e continui (*impropri*)

$$\psi(q) = \sum_n a_n \psi_n(q) + \int_a(f) \psi_f(q) df = \sum_n \langle \psi_n | \psi \rangle \psi_n(q) + \int \langle \psi_f | \psi \rangle \psi_f(q) df$$

$$\text{ORNONORMALITÀ: } \langle \psi_n | \psi_n \rangle = \delta_{nm} \quad \text{e} \quad \int \psi_f^*(q)\psi_{f'}(q)dq = \delta(f - f')$$

$$\text{COMPLETEZZA: } \sum_n \psi_n(q)\psi_n^*(q') + \int \psi_f(q)\psi_f^*(q')dq = \delta(q - q')$$

CONDIZIONI AL BORDO E REGOLARITÀ STATI QUANTISTICI

STATI LEGATI: ψ normalizzabile ($\psi \in \mathbb{L}^2$) $\Rightarrow$ spettro discreto (sistema confinato)

$$\text{Al bordo: } \psi(\infty) = 0$$

STATI DI SCATTERING: ψ non normalizzabile $\Rightarrow$ spettro continuo (sistema libero a $r \rightarrow \infty$)

$$\text{Al bordo: } \langle \psi | \phi \rangle < \infty \text{ con } \phi | \lim_{r \rightarrow \infty} (r^n \phi) = 0 \quad \forall n \text{ (decrescenza rapida)}$$

2.8 Delta di Dirac

DELTA DI DIRAC:

$\delta(x - x_0)$ è una distribuzione | $\langle \delta(x - x_0), \psi(x) \rangle = \psi(x_0)$

SUCCESSIONI CHE TENDONO ALLA $\delta(x)$:

$$g \mid \int_{-\infty}^{\infty} g(x) dx = 1 \Rightarrow \lim_{n \rightarrow \infty} n \int_{-\infty}^x g(nt) dt = \int_{-\infty}^{nx} g(t) dt = \theta(x) \Rightarrow \lim_{n \rightarrow \infty} ng(nx) = \delta(x)$$

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{\pi} \frac{\sin(nx)}{x} = \delta(x) \quad \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{\pi} \frac{\sin^2(nx)}{nx^2} = \delta(x) \quad \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n\pi} \frac{1}{1/n^2 + x^2} = \delta(x)$$

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\pi} \frac{\varepsilon}{\varepsilon^2 + x^2} = \delta(x) \quad \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \frac{1}{x \pm i\varepsilon} = \text{VP} \frac{1}{x} \mp i\pi\delta(x) \quad \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\sqrt{\pi\varepsilon}} e^{-x^2/\varepsilon^2} = \delta(x)$$

δ APPLICATA A FUNZIONE:

$$\delta(f(x)) = \sum_{i=0}^n \frac{\delta(x-x_i)}{|f'(x_i)|} \quad \text{con } f(x) \text{ continua, } x_i \text{ i tutti e soli } \mid f(x_i) = 0 \text{ e } f'(x_i) \neq 0$$

DERIVATA:

$$x\delta'(x) = -\delta(x)$$

$$D\theta(x) = \delta(x)$$

$$D\text{sgn}(x) = 2\delta(x)$$

INTEGRALE:

$$\int \delta(x) = \theta(x) + a \quad (a \text{ spesso determinato da condizioni di parità sulla trasformata})$$

$$\int_0^{\infty} \delta(x) f(x) dx = \frac{1}{2} f(0)$$

VARIAZIONE ARGOMENTO:

$$\delta(ax - x_0) = \frac{1}{|a|} \delta(x - \frac{x_0}{a})$$

$$f(x)\delta(x-y) = f(y)\delta(y-x)$$

$$\delta(-x) = \delta(x)$$

$$x\delta(x) = 0$$

DIMENSIONI FISICHE:

Ha le dimensioni 1/lunghezza: $[\delta(x)] = [x]^{-1}$

3 Equazione di Schrödinger monodimensionale

EQUAZIONE:

Particella in moto monodimensionale:

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi = \frac{2m}{\hbar^2}(V(x) - E)\psi \quad (5)$$

ANDAMENTO:

$E > V(x) \Rightarrow (\psi > 0 \Leftrightarrow \psi'' < 0) \quad ; \quad (\psi < 0 \Leftrightarrow \psi'' > 0) \Rightarrow$ andamento oscillante
 $E < V(x) \Rightarrow (\psi > 0 \Leftrightarrow \psi'' > 0) \quad ; \quad (\psi < 0 \Leftrightarrow \psi'' < 0) \quad ; \quad (\psi = 0 \Rightarrow$ flesso)

TEOREMA DI OSCILLAZIONE:

ψ dell' n -esimo livello energetico discreto ha $n - 1$ nodi (zeri)
(contando E_n crescenti e $n = 0$ per il livello fondamentale)

TEOREMA DI NON DEGENERAZIONE:

Problema unidimensionale su $[-\infty, \infty] \Rightarrow \bar{A}$ degenerazione dei livelli discreti
(cioè: $H\psi_i = E_k\psi_i, \quad H\psi_j = E_k\psi_j \Rightarrow \psi_i = \psi_j$)

3.1 Particella Libera

EQUAZIONE DI SCHRÖDINGER:

$$\psi'' = \frac{2mE}{\hbar^2}\psi = k^2\psi$$

AUTOSTATI DELL'ENERGIA:

$$\psi_{p_0} = \frac{1}{\sqrt{2\pi i \hbar}} e^{\frac{ip_0 x}{\hbar}} \quad \text{con autovalore } E_{p_0} = \frac{p_0^2}{2m} \quad (\text{spettro continuo})$$

SOLUZIONI:

$\psi(x, t) = e^{-iEt/\hbar}(Ae^{ikx} + Be^{-ikx})$
Ammesse solo soluzioni con $E > 0$ ($\bar{A}$ stati legati)

SOLUZIONE SU CERCHIO DI LUNGHEZZA L :

$$\psi(x + L) = \psi(x) \Rightarrow \text{spettro discreto} \quad E_n = \left(\frac{2\pi \hbar n}{\sqrt{2m}L} \right)^2$$

3.2 Buca di potenziale infinitamente alta

POTENZIALE E CONDIZIONI AL BORDO:

$$\begin{cases} V(x) = 0, & 0 < x < a \quad (II) \\ V(x) = \infty, & x \leq 0 \vee x \geq a \quad (I, III) \end{cases}$$

AUTOSTATI DELL'ENERGIA:

$$\begin{cases} \psi_{II n}(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{\pi n x}{a}\right) \quad \text{con } E_n = \left(\frac{\pi \hbar n}{\sqrt{2ma}} \right)^2, \\ \psi_{I, III} = 0 \end{cases}$$

DOMINIO SIMMETRICO RISPETTO ALL'ORIGINE:

$$\text{Traslando: } \begin{cases} V(x) = 0, & -\frac{a}{2} < x < \frac{a}{2} \quad (II) \\ V(x) = \infty, & x \leq -\frac{a}{2} \vee x \geq \frac{a}{2} \quad (I, III) \end{cases} \Rightarrow V(x) = V(-x) \quad (H \text{ simmetrica per parità})$$

$$\text{SOLUZIONE (II): } \psi_{2n} = B_n \cos\left(\frac{(2n+1)\pi}{a}x\right) \quad \psi_{2n+1} = A_n \sin\left(\frac{2n\pi}{a}x\right)$$

PRESSIONE:

$$\text{Supponendo buca come scatola: } \delta W = E_n(a - \delta a) - E_n(a) \equiv P\delta a \Rightarrow P = \frac{(\pi n \hbar)^2}{ma^3} = \frac{2}{a} E_n$$

3.3 Buca di potenziale di altezza finita

POTENZIALE E CONDIZIONI AL BORDO:

$$\begin{cases} V(x) = 0, & -\frac{a}{2} < x < \frac{a}{2} \quad (II) \\ V(x) = V_0, & x \leq -\frac{a}{2} \vee x \geq \frac{a}{2} \quad (I, III) \end{cases} \Rightarrow V(x) = V(-x) \quad (H \text{ simmetrica per parità})$$

EQUAZIONE DI SCHRÖDINGER:

$$\begin{cases} \psi''_{II} = -\frac{2m}{\hbar^2} E \psi = -K_i^2 \psi, \\ \psi''_{I,III} = \frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E) \psi = K_e^2 \psi \end{cases} \Rightarrow K_i^2 + K_e^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2}$$

SOLUZIONE:

Considerati solo stati legati: $V_{min} = 0 < E < V_0$ Soluzioni a parità definita (o pari o dispari)

$$\begin{cases} \psi_{II} = A \cos(K_i x) & \text{pari} \\ \psi_{II} = B \sin(K_i x) & \text{dispari} \\ \psi_I = C e^{-K_e x}, \\ \psi_{III} = D e^{K_e x}, \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} K_i a/2 = \xi \\ K_e a/2 = \eta \end{cases}, (\text{bordo}) \Rightarrow \begin{cases} \xi \tan \xi = \eta \quad (\text{pari}) \\ \xi \cot \xi = -\eta \quad (\text{dispari}) \\ \xi^2 + \eta^2 = \frac{ma^2 V_0}{2\hbar^2} \end{cases}$$

Soluzione individuate per via numerica intersecando equazioni in (ξ, η)

NUMERO STATI LEGATI: $\exists n$ stati legati $\Leftrightarrow \frac{(n-1)\pi}{2} < \sqrt{\frac{ma^2 V_0}{2\hbar^2}} \leq \frac{n\pi}{2}$ ($\exists$ sempre almeno uno)

LIMITE $V_0 \rightarrow \infty$: $\rightarrow$ soluzione buca infinita

CASI CRITICI: $\sqrt{\frac{ma^2 V_0}{2\hbar^2}} = \frac{n\pi}{2} \Rightarrow E = V_0$ (sul bordo della buca) $\Rightarrow$ stato non legato

Attraversando tale valore uno stato si distacca dallo spettro continuo e diventa discreto

Appena $E \sim V_0$ sol. diventa normalizzabile all'esterno buca (all'interno indistinguibile)

POTENZIALE δ (AL LIMITE):

$$\text{POTENZIALE : } \begin{cases} V(x) = -|V_0|, & -\frac{a}{2} < x < \frac{a}{2} \\ V(x) = 0, & x \leq -\frac{a}{2} \vee x \geq \frac{a}{2} \end{cases} \quad \text{con } V_0 \rightarrow \infty, a \rightarrow 0 \mid V_0 a = \text{cost} = Q$$

SOLUZIONE: Singolo stato legato ($\forall x$) $\psi = A e^{-K_e x} \quad E = \frac{-K_e^2 \hbar^2}{2m}$ con $K_e = \sqrt{-2mE}/\hbar$

3.4 Oscillatore Armonico

POTENZIALE:

$$V(x) = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \Rightarrow H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$$

SPETTRO: $\lim_{x \rightarrow \pm\infty} V(x) = +\infty \Rightarrow$ Spettro puramente discreto

EQUAZIONE DI SCHRÖDINGER:

$$\psi'' = \frac{2m}{\hbar^2} (E - \frac{1}{2} m \omega^2 x^2) \psi$$

LIVELLI ENERGETICI (AUTOVALORI):

$$E_n = \omega \hbar (n + \frac{1}{2}) \quad n \in \mathbb{N}$$

ENERGIA DI PUNTO ZERO: $E_0 = \frac{1}{2} \hbar \omega$ minima fluttuazione enegetica compatibile con Heisenberg

EQUIPAZIATO: Spettro equispaziato con $\Delta E = \frac{\omega \hbar}{2}$

POLINOMI DI HERMITE:

FUNZIONE GENERATRICE: $G(x, s) = e^{x^2 - (s-x)^2} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{s^n}{n!} H_n(x)$ (definizione di H_n)

POLINOMI: $H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} (e^{-x^2})$ ($H_0 = 1, \quad H_1 = 2x, \quad H_2 = 4x^2 - 2, \quad H_3 = 8x^3 - 12x, \dots$)

ORTONORMALIZZAZIONE: $\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} H_n(x) H_m(x) dx = \delta_{nm} \sqrt{\pi} 2^n n!$

AUTOSTATI:

$$\psi_n = C_n H_n(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x) e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2} \quad C_n = (\frac{m\omega}{\hbar\pi})^{1/4} (\frac{1}{2^n n!})^{1/2} \quad H_n = \text{polinomi di Hermite}$$

STATO FONDAMENTALE: $\psi_0 = |0\rangle = (\frac{m\omega}{\hbar\pi})^{1/4} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2}$

ELEMENTI DI MATRICE:

$$x_{nm} = \begin{cases} \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \sqrt{(n+1)/2} & m = n+1 \\ \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \sqrt{n/2} & m = n-1 \\ 0 & \text{altrimenti} \end{cases} \quad x_{nm}^2 = \begin{cases} \frac{\hbar}{m\omega} \sqrt{(n+1)(n+2)/4} & m = n+2 \\ \frac{\hbar}{m\omega} \sqrt{n(n-1)/4} & m = n-2 \\ \frac{\hbar}{m\omega} (2n+1)/2 & m = n \\ 0 & \text{altrimenti} \end{cases}$$

$$p_{nm} = -i\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}(\delta_{m,n-1}\sqrt{n} - \delta_{m,n+1}\sqrt{n+1}) = \begin{cases} i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}\sqrt{n+1} & m = n+1 \\ -i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}\sqrt{n} & m = n-1 \\ 0 & \text{altrimenti} \end{cases}$$

3.5 Operatori di Creazione Distruzione - Seconda Quantizzazione**FONONI:**

Autostati dell'energia interpretati come *fononi*: $|n\rangle \leftrightarrow n$ -fononi

OPERATORI:

DISTRUZIONE: $a = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x + i\sqrt{\frac{1}{2m\omega\hbar}}p$

CREAZIONE: $a^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x - i\sqrt{\frac{1}{2m\omega\hbar}}p$

NUMERO DI OCCUPAZIONE: $\mathcal{N} = a^\dagger a$

VARIBILI DINAMICHE:

POSIZIONE: $x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(a + a^\dagger)$

IMPULSO: $p = -i\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}(a - a^\dagger)$

HAMILTONIANA OSCILLATORE ARMONICO: $H = \omega\hbar(a^\dagger a + \frac{1}{2}) = \omega\hbar(\mathcal{N} + \frac{1}{2})$

PROPRIETÀ:

COMMUTATORE: $[a, a^\dagger] = 1$

DISTRUZIONE: $a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle$ a distrugge un fonone

CREAZIONE: $a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle$ $a^\dagger$ crea un fonone

CONTA: $\mathcal{N}|n\rangle = n|n\rangle$ $\mathcal{N}$ conta il numero di fononi

STATO FONDAMENTALE: $|0\rangle$ a minima energia ($a|0\rangle = 0$, normalizzato: $\langle 0|0\rangle = 1$) $\Rightarrow |n\rangle = \frac{(a^\dagger)^n}{\sqrt{n!}}|0\rangle$

STATI COERENTI:

$\psi_\beta \mid \Delta x \Delta p = \hbar/2$ (minimizza l'indeterminazione, pacchetto compatto)

AUTOSTATI DI a : $|\beta\rangle$ coerente $\Leftrightarrow a|\beta\rangle = \beta|\beta\rangle$

DAL FONDAMENTALE: $|\beta\rangle = e^{-\frac{|\beta|^2}{2}} e^{\beta a^\dagger} |0\rangle = \sum_n A_n |n\rangle$ con $A_n = e^{-\frac{|\beta|^2}{2}} \frac{\beta^n}{\sqrt{n!}}$

PROBABILITÀ: $P_n = e^{-|\beta|^2} \frac{|\beta|^{2n}}{n!}$ di osservare n fononi in $|\beta\rangle$

POISSONIANA: P_n = distribuzione poissoniana con media $\langle \beta | \mathcal{N} | \beta \rangle = |\beta|^2$

FUNZIONE D'ONDA: $\psi(x) = \langle x | \beta \rangle = \mathcal{N} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{4(\Delta x)^2} + i\frac{p_0 x}{\hbar}}$

$x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\beta + \beta^*) = A \cos(\phi)$ $p_0 = \sqrt{\frac{2\hbar m\omega}{2}}(\beta^* - \beta) = m\omega A \sin(\phi)$

EVOLUZIONE TEMPORALE: $|\psi_\beta(t)\rangle = e^{-i\omega t/2} |e^{-i\omega t}\psi_\beta\rangle \Rightarrow$ sfasamento (non si perde coerenza)

$x_0(t) = A \cos(\phi + \omega t)$ $p_0(t) = m\omega A \sin(\phi + \omega t)$ (oscillatore classico)

3.6 Buca δ

POTENZIALE:

$V(x) = g\delta(x) \quad g > 0$ (cioè $V(x) = 0 \forall x \neq 0$ con singolarità in 0. Se traslata in a : $V(x) = \delta(x - a)$)

CONDIZIONI DI RACCORDO:

CONTINUITÀ DELLA FUNZIONE: $\lim_{x \rightarrow 0^+} \psi(x) = \lim_{x \rightarrow 0^-} \psi(x) \Leftrightarrow \psi_-(0) = \psi_+(0)$

DISCONTINUITÀ DELLA DERIVATA: $\psi'_+(0) - \psi'_-(0) = -\frac{2mg}{\hbar^2} \psi(0)$

UTILIZZO θ :

$\psi(x) = \psi_-(x)\theta(-x) + \psi_+(x)\theta(x)$ con $\theta'(x) = \delta(x)$

Utilizzata ψ imponendo che soddisfi Schrödinger $\forall x$ (anche in $x = 0$)

SOLUZIONE:

$\psi(x) = \sqrt{k}(\theta(x)e^{kx} + \theta(x)e^{-kx}) \quad k = \frac{\sqrt{-2mE_0}}{\hbar} = \frac{mg}{\hbar^2} \quad E_0 = -\frac{mg}{2\hbar^2}$

Unico stato legato con energia E_0 (se $g < 0 \nexists$ stati legati)

3.7 Spettro Continuo

PROCESSO D'URTO (SCATTERING):

$V(x) \neq 0$ solo su *range limitato* $\Rightarrow$ Spettro continuo ha soluzione di particella libera per x lontani dal range e soluzione diversa e non banale per x prossimi a $V(x) \neq 0$

ONDE:

Modellizzato processo d'urto con onda (supposta nulla incidente nel secondo semispazio):

ONDA INCIDENTE: propaga nella direzione di $V(x)$ (sul quale "urta")

ONDA TRASMESSA: propaga oltre $V(x)$, allontanandosi nello stesso verso dell'onda incidente

ONDA RIFLESSA: propaga nello stesso semispazio dell'onda incidente, in verso opposto.

FLUSSO DI CORRENTE: $j = \frac{i\hbar}{2m} \left(\left(\frac{d}{dx} \psi^* \right) \psi - \psi^* \left(\frac{d}{dx} \psi \right) \right)$ (numero di particelle per unità di tempo)

ONDA INCIDENTE Se $\psi = Ae^{ikx} \Rightarrow j = \frac{\hbar k |A|^2}{m}$

COEFFICIENTE DI RIFLESSIONE: $R = \frac{j_R}{j_I}$ probabilità che ψ sia riflessa

COEFFICIENTE DI TRASMISSIONE: $T = \frac{j_T}{j_I}$ probabilità che ψ sia trasmessa

PROBABILITÀ TOTALE: $T + R = 1$

STAZIONARIETÀ: diffusione stazionaria (indipendente dal tempo), non si studia propagazione

NORMALIZZAZIONE: ψ nel continuo non normalizzabile, ma non rilevante: osservabili sono rapporti di j

DEGENERAZIONE: $\det \Omega \neq 0 \Rightarrow$ stati non degeneri, dove Ω = matrice di transfer

BARRIERA FINITA DI POTENZIALE:

POTENZIALE: $\begin{cases} V(x) = 0, & x < 0 \vee x > a & (I, III) \\ V(x) = V_0, & 0 \leq x \leq a & (II) \end{cases}$

SOPRA LA BARRIERA ($E > V_0$):

SOLUZIONE: $\begin{cases} \psi_I = e^{iK_e x} + Ae^{-iK_e x} & K_e = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \\ \psi_{II} = Be^{iK_i x} + B'e^{-iK_i x} & K_i = \frac{\sqrt{2m(E-V_0)}}{\hbar} \\ \psi_{III} = Ce^{ik_e x} \end{cases}$

COEFFICIENTE DI TRASMISSIONE: $T = \frac{4K_e^2 K_i^2}{4K_e^2 K_i^2 + (K_e^2 - K_i^2) \sin^2(K_i^2 a)}$

COEFFICIENTE DI RIFLESSIONE: $R = \frac{(K_e^2 - K_i^2) \sin^2(K_i^2 a)}{4K_e^2 K_i^2 + (K_e^2 - K_i^2) \sin^2(K_i^2 a)}$

EFFETTO ONDULATORIO: $R \neq 0$ nonostante particella abbia $E > V_0$

EFFETTO RAMSAUER-TAUNSEND: $E = \sqrt{2m(E - V_0)}a/\hbar = n\pi \quad n \in \mathbb{N} \Rightarrow D = 1$ (trasmis. totale)

LIMITI: $E \gg V_0 \Rightarrow T \rightarrow 1, R \rightarrow 0$ (tras. totale) $E \rightarrow 0 \Rightarrow T \rightarrow 0, R \rightarrow 1$ (r rifl. totale)

SOTTO LA BARRIERA ($E < V_0$):

$$\text{SOLUZIONE: } \begin{cases} \psi_I = e^{iK_e x} + A e^{-iK_e x} & K_e = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \\ \psi_{II} = B e^{-K_i x} + B' e^{K_i x} & K_i = \frac{\sqrt{2m(V_0-E)}}{\hbar} \\ \psi_{III} = C e^{ik_e x} \end{cases}$$

$$\text{COEFFICIENTE DI TRASMISSIONE: } T = \frac{4K_e^2 K_i^2}{4K_e^2 K_i^2 + (k_e^2 + k_i^2) \sin^2(k_i^2 a)}$$

$$\text{COEFFICIENTE DI RIFLESSIONE: } R = \frac{(K_e^2 + k_i^2) \sin^2(K_i^2 a)}{4K_e^2 K_i^2 + (K_e^2 + K_i^2) \sin^2(K_i^2 a)}$$

EFFETTO TUNNEL: $T \neq 0$ nonostante particella abbia $E < V_0$

$$\text{LIMITI: (barriera grande) } \lim_{V_0 \rightarrow \infty} T = \lim_{a \rightarrow \infty} T = \sim e^{-2\sqrt{sm(V_0-E)}a/\hbar}$$

BUCA FINITA DI POTENZIALE:

$$\text{POTENZIALE: } \begin{cases} V(x) = 0, & x < 0 \vee x > a & (I, III) \\ V(x) = V_0, & 0 \leq x \leq a & (II) \end{cases}$$

SOLUZIONE: Stati con $E > 0$ individuati in analogia con *barriera*, con sostituzione $K_i \rightarrow K_i = \frac{\sqrt{2m(E+|V_0|)}}{\hbar}$

TRASLAZIONE DEGLI ASSI:

traslando l'asse $x' = x + d \Rightarrow x_V \rightarrow x_V - d$ (una coordinata del potenziale) $\Rightarrow A'(d) = e^{-2ikd}$ $C'(d) = C$

GRADINO DI POTENZIALE

$$\text{POTENZIALE } \begin{cases} V(x) = 0 & x < 0 & (I) \\ V(x) = V_0 > 0 & x \geq 0 & (II) \end{cases}$$

SOPRA IL GRADINO ($E > V_0$):

$$\text{SOLUZIONE: } \begin{cases} \psi_I = e^{iK_e x} + A e^{-iK_e x} & K_e = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} & A = \frac{iK_e + K_i}{iK_e - K_i} \\ \psi_{II} = B e^{-K_i x} & K_i = \frac{\sqrt{2m(V_0-E)}}{\hbar} & B = \frac{2iK_e}{iK_e - K_i} \end{cases}$$

COEFFICIENTE DI TRASMISSIONE: $T = 0$

COEFFICIENTE DI RIFLESSIONE: $R = 1$ (caso classico ma sfasamento di $A = e^{i\varphi}$)

SOTTO IL GRADINO ($E < V_0$):

$$\text{SOLUZIONE: } \begin{cases} \psi_I = e^{iK_e x} + A e^{-iK_e x} & K_e = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} & A = \frac{K_e - K_i}{K_i + K_e} \\ \psi_{II} = B e^{iK_i x} & K_i = \frac{\sqrt{2m(V_0-E)}}{\hbar} & B = \frac{2K_e}{K_i + K_e} \end{cases}$$

$$\text{COEFFICIENTE DI TRASMISSIONE: } T = \frac{4K_i K_e}{(K_i + K_e)^2}$$

$$\text{COEFFICIENTE DI RIFLESSIONE: } R = \frac{(K_e - K_i)^2}{(K_i + K_e)^2}$$

BUCA O BARRIERA δ :

POTENZIALE: $V(x) = g\delta(x)$ Buca: $g > 0$ Barriera: $g < 0$

$$\text{SOLUZIONE: } \psi(x) = \theta(-x)(A e^{ikx} + B e^{-ikx}) + \theta(x)(C e^{ikx} + D e^{-ikx}) \quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

$$\text{MATRICE DI TRANSFER: } \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1-i\alpha & -i\alpha \\ i\alpha & 1+i\alpha \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} = \Omega \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} \quad \alpha = \frac{mg}{\hbar^2}$$

AUTOSTATI: $\forall k \in \mathbb{R}$ se $\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \Omega \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} \Rightarrow \psi(x)$ rappresenta un autostato di H

$$\text{DIFFUSIONE: Particella incidente} \Rightarrow T = 0 \Rightarrow T = \frac{1}{1+\alpha^2} \quad R = \frac{\alpha^2}{1+\alpha^2}$$

DOPPIA δ :

POTENZIALE: $V(x) = g(\delta(x) + \delta(x - a))$ Buca: $g > 0$ Barriera: $g < 0$ $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$

SOLUZIONE: $\psi(x) = \theta(-x)(Ae^{ikx} + Be^{-ikx}) + \theta(x)\theta(a-x)(Ce^{ikx} + De^{-ikx}) + \theta(x-a)(Fe^{ikx} + Ge^{-ikx})$

MATRICE DI TRANSFER: $\begin{pmatrix} F \\ G \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{-ika} & 0 \\ 0 & e^{-ika} \end{pmatrix} \cdot \Omega \cdot \begin{pmatrix} e^{-ika} & 0 \\ 0 & e^{-ika} \end{pmatrix} \cdot \Omega \cdot \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix}$ $\Omega = \begin{pmatrix} 1-i\alpha & -i\alpha \\ i\alpha & 1+i\alpha \end{pmatrix}$ $\alpha = \frac{mg}{\hbar^2}$

DIFFUSIONE: Particella incidente $\Rightarrow T = \frac{1}{1+4\alpha^2(\cos(ka)+\alpha\sin(ka))^2}$ $R = \frac{4\alpha^2(\cos(ka)+\alpha\sin(ka))}{1+4\alpha^2(\cos(ka)+\alpha\sin(ka))^2}$

LIMITI: $\alpha \rightarrow \infty$ ($g \rightarrow \infty$) $\Rightarrow T \rightarrow 0, R \rightarrow 1$

FILTRO DI ENERGIA: $\tan(ka) = -\frac{1}{\alpha} \Rightarrow R = 0$ $T = 1$

LIMITE: $g \rightarrow \infty \Rightarrow ka = \pi n \Leftrightarrow \frac{2\pi a}{\lambda} = \pi n$ Filtro a lunghezze d'onda fissate

ONDE STAZIONARIE: Tutte le onde interne alle δ sono in fase quindi stazionarie (altre distrutte per interferenza), quindi ogni onda entrante deve uscire $\Rightarrow T = 1$

4 Rappresentazioni

RAPPRESENTAZIONE:

Espressione delle variabili dinamiche e delle funzioni d'onda in funzione di un particolare operatore χ

BASE: autostati (propri o impropri) di χ : $\{|\psi_\chi\rangle\}$ (ortonormali) con $\psi_{\chi_0}(\chi) = \delta(\chi - \chi_0)$

In generale è possibile scegliere qualsiasi set ortonormale come rappresentazione

FUNZIONE D'ONDA: $\psi(\chi) = \langle \psi_\chi(v) | \psi(v) \rangle = \int \psi_\chi^*(v) \psi(v) dv$ dove v è vecchia coordinata con base ψ_v

RAPPRESENTAZIONE DELLE COORDINATE:

BASE: autostati della posizione $\psi_{\mathbf{x}_0}(\mathbf{x}) = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)$ $\psi_{\mathbf{x}_0}(\mathbf{p}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}_0/\hbar}$

STATO: $\psi(\mathbf{x}) = \langle \psi(\mathbf{x}) | \psi_{\mathbf{x}_0}(\mathbf{x}) \rangle = \int \psi(\mathbf{x}) \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) d\mathbf{x}_0$

OPERATORE POSIZIONE: $\hat{\mathbf{q}} = \mathbf{q}$

OPERATORE IMPULSO: $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla$ (Monodimensionale: $\hat{p} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial q}$)

RAPPRESENTAZIONE DEGLI IMPULSI:

BASE: autostati dell'impulso $\psi_{\mathbf{p}_0}(\mathbf{x}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{i\mathbf{p}_0\cdot\mathbf{x}/\hbar}$ $\psi_{\mathbf{p}_0}(\mathbf{p}) = \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}_0)$

STATO: $\hat{\psi}(\mathbf{p}) = \langle \psi_{\mathbf{p}_0}(\mathbf{x}) | \psi(\mathbf{x}) \rangle = \int \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{-i\mathbf{p}_0\cdot\mathbf{x}/\hbar} \psi(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \mathcal{F}(\psi(\mathbf{x}))$

OPERATORE POSIZIONE: $\hat{\mathbf{q}} = i\hbar\nabla$ (Monodimensionale: $\hat{x} = i\hbar\frac{\partial}{\partial p}$)

OPERATORE IMPULSO: $\hat{\mathbf{p}} = \mathbf{p}$

4.1 Struttura Matematica

SPAZIO DI HILBERT:

KET: $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ di Hilbert

PRODOTTO INTERNO: $\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle = \langle \psi_2 | \psi_1 \rangle^*$

SET COMPLETO ORTONORMALE: $\exists \{ \psi_n \} | \psi = \sum_n c_n \psi_n$ $c_n = \langle \psi_n | \psi \rangle$

NORMA: $\|\psi\|^2 = \langle \psi | \psi \rangle = \sum_n \langle \psi_n | \psi \rangle$

DISTANZA: $d(\psi_1, \psi_2) = \|\psi_1 - \psi_2\|$

OPERATORI AUTOAGGIUNTI:

Ogni variabile dinamica è associata a operatore autoaggiunto

VALOR MEDIO: A, B autoaggiunti $|\langle \psi | A | \psi \rangle = \langle \psi | B | \psi \rangle \forall \psi \Rightarrow A = B$

TEOREMA DI VON NEUMANN A, B autoaggiunti $[A, B] = 0 \Rightarrow \exists$ operatore R $A = f(R)$ $B = g(R)$

SPETTRO:

RISOLVENTE: di un operatore A : $\rho(x) = \{x | \exists (A - x\mathbb{I})^{-1}\}$

SPETTRO: di un operatore A : $\sigma(x) = \{x | x \notin \rho(x)\}$

SPETTRO DISCRETO: $\lambda \quad | \quad (A - \lambda_n) |\psi_n\rangle = 0 \quad \|\psi_n\| = 1 \forall n$

SPETTRO CONTINUO (CRITERIO DI WEYL): $\lambda \quad | \quad \exists \{ \psi_n \} | \lim_{n \rightarrow \infty} \|A\psi_n - \lambda\psi_n\| = 0 \quad \|\psi_n\| = 1$

PROIETTORI: proietta nell'autospazio relativo all'autovalore, α = degenerazione dell'autovalore

AUTOSPAZIO PROPRIO (AUTOVALORE DISCRETO): $\Pi_n = \sum_\alpha |n, \alpha\rangle \langle n, \alpha|$ ($|n\rangle \equiv |\psi_{\lambda_n}\rangle$)

AUTOSPAZIO IMPROPRIO (AUTOVALORE CONTINUO): $\Pi_c(\lambda) = \int_{\lambda_{\min}}^\lambda \left(\sum_\alpha |\lambda', \alpha\rangle \langle \lambda' \alpha| \right) d\lambda'$

TEOREMA SPETTRALE:

$\forall A$ autoaggiunto $\exists$ insieme di autovalori $\{\lambda_n, \lambda\}$ e insieme di proiezioni ortogonali $\{\Pi(\lambda)\} = \{\Pi_n(\lambda), \Pi_c(\lambda)\} |$

PROIETTORI: $\Pi(\lambda) = \int_{\lambda_{\min}}^{\lambda} \left(\sum_{\alpha} |\lambda', \alpha\rangle \langle \lambda' \alpha| + \sum_n \delta(\lambda' - \lambda_n) \sum_{\alpha} |n, \alpha\rangle \langle n, \alpha| \right) d\lambda' \quad (\alpha = \text{degenerazione})$

IDENTITÀ: $\mathbb{I} = \int_{\lambda} d\Pi(\lambda')$

FUNZIONE D'ONDA: $|\psi\rangle = \int_{\lambda} d\Pi(\lambda') |\psi\rangle = \int_{\lambda} d\Pi_c(\lambda') |\psi\rangle + \sum_n \Pi_n |\psi\rangle$

OPERATORE: $A = \int_{\lambda} \lambda d\Pi(\lambda') = \int_{\lambda} \lambda d\Pi_c(\lambda') + \sum_n \lambda_n \Pi_n$

FUNZIONE SU OPERATORE: $f(A) = \int_{\lambda} f(\lambda) d\Pi(\lambda') = \int_{\lambda} f(\lambda) d\Pi_c(\lambda') + \sum_n f(\lambda_n) \Pi_n$

VALOR MEDIO: $\langle \psi | A | \psi \rangle = \int \lambda d|\Pi(\lambda)|^2 = \int \lambda \sum_{\alpha} |\langle \lambda, \alpha | \psi \rangle|^2 d\lambda + \sum_n \lambda_n \sum_{\alpha} |\langle \lambda_n, \alpha | \psi \rangle|^2$

PROBABILITÀ: $\mathcal{P}_n = \sum_{\alpha} |\langle n, \alpha | \psi \rangle|^2 \quad \mathcal{P}_c(\lambda) d\lambda = \sum_{\alpha} |\langle \lambda, \alpha | \psi \rangle|^2 d\lambda$ (densità)

SCARTO: $\Delta A = \langle \psi | A^2 | \psi \rangle$

TRASFORMAZIONI UNITARIE:

Cambio rappresentazione $\Leftrightarrow$ non cambia fisica $\Leftrightarrow$ applicazione trasformazione unitaria

Stati e operatori definiti a meno di trasformazioni unitarie

U unitaria $\Rightarrow |\tilde{\psi}\rangle = U |\psi\rangle \quad \tilde{A} = U A U^\dagger \Rightarrow \langle \tilde{\psi} | A | \tilde{\psi} \rangle = \langle \psi | A | \psi \rangle \quad ||\tilde{\psi}|| = ||\psi||$

DECOMPOSIZIONE SPETTRALE: $U = \int_0^{2\pi} e^{i\lambda} d\Pi(\lambda) = \int_0^{2\pi} e^{i\lambda} d\Pi_c(\lambda) + \sum_n e^{i\lambda_n} \Pi_n$

TEOREMA DI STONE:

$U(t)$ unitario e continuo in $\mathcal{H} \Rightarrow \exists A$ operatore autoaggiunto in $\mathcal{H} | U(t) = e^{itA} \equiv \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(itA)^k}{k!}$

$\forall \psi \in D$ dominio di $A \Leftrightarrow \lim_{t \rightarrow 0} \frac{U(t)\psi - \psi}{t} = iA\psi$

GENERATORE INFINITESIMALE: A è il generatore della trasformazione infinitesima indotta da U

PRINCIPIO DI INDETERMINAZIONE:

$[p, q^N] = -i\hbar N q^{N-1} \Rightarrow 2||p|| ||q|| \geq N\hbar \quad (\text{in generale } [p, f(q)] = -i\hbar \frac{df(q)}{dq})$

$\forall A, B | [A, B] = i\hbar C \Rightarrow \Delta A \Delta B \geq \frac{\hbar}{2} \langle C \rangle$

TEMPO (TEOREMA DI PAULI):

Il tempo non è un osservabile quantistica o avrebbe un operatore autoaggiunto coniugato a H che risulterebbe avere uno spettro continuo $\in [-\infty, \infty] \Rightarrow$ assurdo

RAPPRESENTAZIONI IN TEORIA DEI GRUPPI

dato gruppo G e insieme M_N delle matrici $N \times N$: la rappresentazione R del gruppo G è l'applicazione:

$R(g) : G \rightarrow M_N$ surgettiva $| R(g_1 g_2) = R(g_1) R(g_2) \quad \forall g_1, g_2 \in G$

SPAZIO DELLE RAPPRESENTAZIONI: spazio V d'azione delle matrici M_n

RAPPRESENTAZIONE PROIETTIVA: generalizzazione $g \rightarrow R(g) | R(g_1) R(g_2) = e^{i\omega_{g_1, g_2}} U(g_1 g_2)$

UNITARIE: $R | R(g_n) = U_n$ unitaria con $\{g_n\}$ base del gruppo

EQUIVALENZA: $R \sim \tilde{R} \Leftrightarrow \exists S | R(g) = S \tilde{R}(g) S^{-1} \quad \forall g \in G$ (similitudine)

RIDUCIBILE: $\exists W \subset V$ sottospazio vettoriale $| G(W) = W$ (IRRIDUCIBILE se $\nexists W | G(W) = W$)

MECCANICA QUANTISTICA: V = spazio funzioni d'onda, con R proiettiva unitaria

GRUPPO DI LIE:

G la cui varietà (spazio dei parametri) è analitica (differenziabile, operazioni di gruppo differenziabili)

COMPATTO: G di Lie con varietà compatta $\Rightarrow G \sim U$ (U rappresentazione unitaria)

GENERATORI: $A_i | U_{\{\alpha\}} = e^{i\alpha_i A_i}$ (da Stone) con α = parametri

TRASFORMAZIONI INFINITESIME: A_i generano trasformazioni $U_{\{\varepsilon\}} = \mathbb{I} + i\varepsilon_i A_i + o(\varepsilon)$

ALGEBRA (DEL GRUPPO DI LIE G): $[A_i, A_j] = \sum_k i c_{ijk} A_k$ con c_{ijk} = costanti di struttura

4.2 Schema di Heisenberg

EVOLUZIONE TEMPORALE:

Trasformazione unitaria $|\psi(t)\rangle = e^{-iHt/\hbar} |\psi(0)\rangle$

CAMBIO DI RAPPRESENTAZIONE:

Applicazione di $U(t) = e^{iHt/\hbar}$ su schema di Schrödinger

FUNZIONE D'ONDA: $\psi_H = e^{iHt/\hbar} |\psi(t)\rangle = |\psi(0)\rangle$

OPERATORI: $A_H(t) = e^{iHt/\hbar} A e^{-iHt/\hbar}$

VALOR MEDIO: $\langle \psi(t) | A | \psi(t) \rangle = \langle \psi(0) | A_H | \psi(0) \rangle$

COINCIDENZA: i due schemi coincidono a $t = 0$: $A_H(0) = A \quad |\psi_H\rangle = |\psi(0)\rangle$

EQUAZIONE DI HEISENBERG

$$i\hbar \frac{dA_H}{dt} = i\hbar \frac{\partial A_H}{\partial t} + [A_H, H] \quad (6)$$

Lo stato quantistico è costante nel tempo, l'operatore evolve nel tempo (dove $\frac{\partial A_H}{\partial t} \equiv \left(\frac{\partial A}{\partial t}\right)_H$)

VARIABILI CANONICHE:

VARIABILI: $\mathbf{q}_H(t) = U(t)\mathbf{q}(t)U^\dagger(t) \quad \mathbf{p}_H(t) = U(t)\mathbf{p}(t)U^\dagger(t)$

EVOLUZIONE TEMPORALE: $\frac{d}{dt}\mathbf{q}_H = -\frac{i}{\hbar}[\mathbf{q}_H, H] \quad \frac{d}{dt}\mathbf{p}_H = -\frac{i}{\hbar}[\mathbf{p}_H, H]$

COMMUTATORE FONDAMENTALE: a tempi uguali $[q_{Hi}(t), p_{Hj}(t)] = i\hbar\delta_{ij} \Rightarrow$ stessa forma nei due schemi

FORMA: $f(\mathbf{q}, \mathbf{p}) \rightarrow f(\mathbf{q}_H, \mathbf{p}_H)$ uguale in forma $\Rightarrow \forall A$ valgono stesse relazioni in $(\mathbf{p}, \mathbf{q})$ o in $(\mathbf{p}_H, \mathbf{q}_H)$

HAMILTONIANA: $H_H = H$ non solo in forma: $\forall$ relazione è possibile utilizzare indifferentemente H o H_H

AUTOVALORI (TEOREMA KOGAN GALITSKY - KG):

$\psi(0)$ autostato di $\hat{F}$ con autovalore $f_0 \Rightarrow \psi(t)$ autostato di $\hat{F}_H(-t)$ di Heisenberg con autovalore f_0

OSCILATORE ARMONICO:

HAMILTONIANA: $H_H = \frac{p_H^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}x_H^2$

EQUAZIONI DI HEISENBERG: $m\dot{x}_H = p_H \quad \dot{p}_H = -m\omega^2 x_H$

EQUAZIONI DEL MOTO: $x_H(t) = x_0 \cos(\omega t) + \frac{p_0}{m\omega} \sin(\omega t) \quad p_H(t) = p_0 \cos(\omega t) - m\omega x_0 \sin(\omega t)$

DISPERSIONE PACCHETTO: $\langle x^2 \rangle = x_0^2 \cos^2(\omega t) + \frac{p_0^2}{m^2\omega^2} \sin^2(\omega t) \quad \langle p^2 \rangle = p_0^2 \cos^2(\omega t) + m^2\omega^2 x_0^2 \sin^2(\omega t)$

TRASLAZIONI SPAZIALI:

OPERATORE: $T(\mathbf{a}) = e^{i\mathbf{a}\cdot\mathbf{p}/\hbar}$ impulso generatore infinitesimale delle traslazioni spaziali

AZIONE SU FUNZIONE D'ONDA: $T(\mathbf{a})\psi(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r} + \mathbf{a})$

AZIONE SU OPERATORI: $T(\mathbf{a})A(\mathbf{r}, \mathbf{p})T^\dagger(\mathbf{a}) = A(\mathbf{r} + \mathbf{a}, \mathbf{p})$

AZIONE SU AUTOSTATI VARIABILI CANONICHE: $T(\mathbf{a})|\mathbf{q}_0\rangle = |\mathbf{q}_0 - \mathbf{a}\rangle \quad T(\mathbf{a})|\mathbf{p}_0\rangle = e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{a}}|\mathbf{p}_0\rangle$

RAPPRESENTAZIONE IMPULSI: $V(\mathbf{b}) = e^{i\mathbf{b}\cdot\mathbf{q}/\hbar} \Rightarrow V(\mathbf{b})\psi(\mathbf{p}) = \psi(\mathbf{p} - \mathbf{b})$

SU AUTOSTATI VARIABILI CANONICHE: $V(\mathbf{b})|\mathbf{q}_0\rangle = e^{i\mathbf{b}\cdot\mathbf{q}}|\mathbf{q}_0\rangle \quad V(\mathbf{b})|\mathbf{p}_0\rangle = |\mathbf{p}_0 + \mathbf{b}\rangle$

4.3 Stati Misti

STATO PURO:

stato completamente descrivibile con funzione d'onda $|\psi\rangle$

STATO MISTO:

stato parzialmente inaccessibile non descrivibile con funzione d'onda

- insieme statistico: $N \sim 10^{23} \Rightarrow$ distribuzioni di probabilità (oltre incertezza quantistica)
- insieme massimale di osservabile di n elementi, ma noti solo $i < n$ osservabili
- nota azione di osservabile solo su sottoinsieme interagente con insieme globale ($|\psi\rangle$ non fattorizzabile)

MATRICE DENSITÀ:

NOTA SOLO SU SOTTISIEME:

$\rho_{nm} = \int c_n(q) c_m^*(q) dq$ dove $\psi(q, x) = \sum_n c_n(q) \psi_n(x) \Rightarrow c_n(q) = \langle q, n | \psi \rangle$
 (è nota azione di F su x ma non su $q \Rightarrow$ espressa funzione d'onda complessiva in autostati di x)

INSIEME STATISTICO:

$\rho_{nm} = \sum_i \mathcal{P}_i \langle n | \psi_i \rangle \langle \psi_i | m \rangle = \sum_i \mathcal{P}_i c_n^i c_m^{i*}$
 dove: $|\psi^i(t)\rangle = \sum_n c_n^i |n\rangle$ sono gli osservabili accessibili, $\{|n\rangle\}$ base ortonormale
 $\mathcal{P}_i$ = probabilità (statistica) che il sistema si trovi nello stato i

SOTTOINSIEMI INTERAGENTI:

$\psi(x, q) \neq \psi_A(x) \psi_B(q)$ con $\{|j\rangle\}$ base di A , $\{|\alpha\rangle\}$ base di $B \Rightarrow |\psi\rangle = \sum_{j,\alpha} c_{j\alpha} |j\rangle \otimes |\alpha\rangle$

MATRICE DENSITÀ: $\rho_{jk} \equiv \sum_{\alpha} c_{j\alpha} c_{k\alpha}^*$

VALOR MEDIO OPERATORE: $\langle F \rangle = \text{Tr}(\rho F)$

PROPRIETÀ MATRICIALI: Traccia: $\text{Tr}(\rho) = 1$ Determinante: $\det(\rho) \geq 0$ Autoaggiunta: $\rho^\dagger = \rho$

ELEMENTI: $0 \leq \rho_{nn} \leq 1$ $|\rho_{nm}|^2 \leq \rho_{mm} \rho_{nn}$

EVOLUZIONE TEMPORALE: $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \rho_{nm} = [H, \rho]_{nm}$

STATO PURO: stato puro $\Rightarrow \psi = \sum_n c_j |\psi_j\rangle \Leftrightarrow \rho^2 = \rho$, $\rho_{jk} = c_j c_k^*$

SISTEMI A DUE STATI:

BASE: stati possibili: $|z_+\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ $|z_-\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ (polarizzazione fotoni, spin $\frac{1}{2} \dots$)

PROIETTORI: su autostati: $\Pi_{z_+} = |z_+\rangle \langle z_+| = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$ $\Pi_{z_-} = |z_-\rangle \langle z_-| = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$
 su assi a $\pm \frac{\pi}{4} \Rightarrow$ su stati $|x_\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|z_+\rangle \pm |z_-\rangle)$: $\Pi_{x_+} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$ $\Pi_{x_-} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}$
 circolari $\Rightarrow$ su stati $|y_\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|z_+\rangle \pm i |z_-\rangle)$: $\Pi_{y_+} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & -i \\ i & 1 \end{pmatrix}$ $\Pi_{y_-} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & i \\ -i & 1 \end{pmatrix}$

STATO PURO: $\psi = c_1 |1\rangle + c_2 |2\rangle \Rightarrow \rho = \begin{pmatrix} c_1^2 & c_1 c_2^* \\ c_1^* c_2 & c_2^2 \end{pmatrix}$

STATO TOTALMENTE NON POLARIZZATO: $\rho = \begin{pmatrix} 1/2 & 0 \\ 0 & 1/2 \end{pmatrix} \Rightarrow \langle \Pi_1 \rangle = \langle \Pi_2 \rangle = \frac{1}{2}$

STATO MISTO: $\rho = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1+\xi_3 & \xi_1-i\xi_2 \\ \xi_1+i\xi_2 & 1-\xi_3 \end{pmatrix} = \frac{1}{2}(\mathbb{I} + \sigma_i \xi_i)$ $\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ $\sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$ $\sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$

PARAMETRI DI STOKES: $\xi_i \in \mathbb{R}$ $\xi_1^2 + \xi_2^2 + \xi_3^2 = \xi^2 \leq 1$

PUREZZA: $\xi^2 \sim$ purezza dello stato ($\xi^2 = 1 \Rightarrow$ stato puro)

PROIETTORI: $\langle \Pi_{i_+} \rangle = \frac{1+\xi_i}{2}$ $\langle \Pi_{i_-} \rangle = \frac{1-\xi_i}{2} \Rightarrow \mathcal{P}(i_+) - \mathcal{P}(i_-) = \xi_i$ dove $x \leftrightarrow 1, y \leftrightarrow 2, z \leftrightarrow 3$

4.4 Simmetrie

SIMMETRIA DELL'HAMILTONIANA:

Sistema simmetrico rispetto a quantità S , cioè S simmetria di $H \Leftrightarrow S^\dagger H S = H$ (H è conservata sotto S)

CONSERVAZIONE: $\frac{\partial S}{\partial t} = 0$, S simmetria di $H \Rightarrow [S, H] = 0 \Rightarrow \frac{dS}{dt} = 0$ (S si conserva)

AUTOSTATI: S simmetria di H , $|\psi_s(0)\rangle$ autostato di $S \Rightarrow |\psi_s(t)\rangle$ autostato di S

DEGENERAZIONE: S simmetria di H , $|\psi_n\rangle$ autostato di H ma non di $S \Rightarrow |\psi_n\rangle$ degenerare

CONTINUITÀ: Continua: S descritta da parametri continui Discreta: S descritta da parametri discreti

TEOREMA DI WIGNER:

$\forall S$ simmetria di $H \exists U$ unitario o O antiunitario che genera S

TRASFORMAZIONE UNITARIA: operatore $U | \forall \psi, \phi \Rightarrow \langle U\psi | U\phi \rangle = \langle \psi | \phi \rangle$

TRASFORMAZIONE ANTINUNITARIA: operatore $O | \forall \psi, \phi \Rightarrow \langle O\psi | O\phi \rangle = \langle \phi | \psi \rangle$

REGOLA SI SELEZIONE:

Stati ψ_1, ψ_2 assumono diversi valori della quantità S : $\forall$ hamiltoniana H si ha $\langle \psi_1 | H | \psi_2 \rangle = 0 \Rightarrow S$ è seletta
 S quantità seletta $\Rightarrow \exists$ regola di selezione associata che determina l'annullamento di $\langle \psi_1 | H | \psi_2 \rangle$

REGOLA DI SUPERSELEZIONE:

Stati ψ_1, ψ_2 assumono diversi valori della quantità S : $\forall$ osservabile A si ha $\langle \psi_1 | A | \psi_2 \rangle = 0 \Rightarrow S$ è superseletta
 S quantità superseletta $\Rightarrow \exists$ regola di superselezione associata che determina l'annullamento di $\langle \psi_1 | A | \psi_2 \rangle$
 S superseletta $\Rightarrow S$ seletta

ENERGIA:

CONSERVAZIONE: E conservata in ogni sistema

SELEZIONE: E seletta: autostati stazionari (mantengono autovalori in evoluzione temporale)

NON SUPERSELEZIONE: E non superseletta: sotto A , $[A, H] \neq 0 \Rightarrow |\psi_n\rangle$ autostati di E non restano tali e si mescolano

CARICA ELETTRICA:

CONSERVAZIONE: Q conservata $\forall H$ (non relativisticamente da conservazione numero particelle)

AUTOSTATI: non relativisticamente non scrivibile in forma chiusa, ma su particelle elementari:

$$Q|e\rangle = -e|e\rangle \quad Q|p\rangle = +e|p\rangle \quad Q|n\rangle = 0$$

SUPERSELEZIONE: Q superseletta: autostati di carica restano sempre isolabili

PARITÀ:

$$\mathcal{P}\psi(\mathbf{r}) = \psi(-\mathbf{r}) \quad \mathcal{P}A(\mathbf{r}, \mathbf{p})\mathcal{P}^{-1} = A(-\mathbf{r}, -\mathbf{p})$$

$$\text{FORMA CHIUSA: } \mathcal{P} = e^{\frac{i\pi}{\hbar}(\frac{q^2}{2} + \frac{p^2}{2} - \frac{\hbar^2}{2})}$$

SIMMETRIA APPROSSIMATA: $\forall H$ gravitazionale, elettromagnetico e forte $\mathcal{P}$ si conserva ma interazioni deboli violano conservazione parità (scambi W e Z non $\mathcal{P}$ -invarianti)

AUTOSTATI: Autovalori: $\pm 1 \Rightarrow$ Autostati: $\mathcal{P}\psi(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r}) = |+\rangle \quad \mathcal{P}\psi(\mathbf{r}) = -\psi(\mathbf{r}) = |-\rangle$

$$\text{SIMMETRIA SFERICA: } [\hat{L}, H] = 0 \Rightarrow \psi = R_{n,\ell} Y_{\ell,m} \Rightarrow \begin{cases} \forall \psi | \ell = 2k \Rightarrow \psi = |+\rangle & (k \in \mathbb{N}) \\ \forall \psi | \ell = 2k + 1 \Rightarrow \psi = |-\rangle & (k \in \mathbb{N}) \end{cases}$$

PARITÀ INTRINSECA: particelle possiedono parità intrinseca: si conserva solo $\mathcal{P}_{tot} = \mathcal{P}_{orb} \mathcal{P}_{spin}$

N PARTICELLE: $\mathcal{P} = (-1)^{\sum_i \ell_i} \prod_i \mathcal{P}_i$ con i = particella, ℓ = autovalore orbitale relativo

$$\text{COMMUTATORI: } [\mathcal{P}, L_i] = 0, \quad [\mathcal{P}, x] \neq 0, \quad [\mathcal{P}, p] \neq 0$$

INVARIANZA DI GALILEO:

$$\text{TRASFORMAZIONI GALILEO: } \mathbf{r}' = \mathbf{r} - \mathbf{v}t$$

CONSERVAZIONE: tutti i sistemi sono invariati per trasformazioni di galileo (trattazione non relativistica)

$$\text{FUNZIONE D'ONDA: } \psi'(\mathbf{r}, t) = e^{\frac{-i}{\hbar} m \mathbf{v}^2 t} e^{\frac{i}{\hbar} m \mathbf{v} \cdot \mathbf{r}} \psi(\mathbf{r} - \mathbf{v}t, t)$$

INVERSIONE TEMPORALE:

$$\mathcal{T}\psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r}, -t)$$

CONSERVAZIONE: $\exists O$ antiunitario $|OH^*O^{-1} = H \Rightarrow$ sistema invariante sotto $\mathcal{T}$
(stessa soluzione a Schrödinger)

$$\text{SOLUZIONE: } \tilde{\psi}(\mathbf{r}, t) = O\psi^*(\mathbf{r}, -t) \text{ risolve } i\hbar \frac{\partial}{\partial(-t)} \psi^*(\mathbf{r}, t) = H^* \psi^*(\mathbf{r}, -t)$$

SIMMETRIA APPROSSIMATA: $\forall H$ gravitazionale, elettromagnetico e forte $\mathcal{P}$ si conserva ma interazioni deboli violano (poche) conservazione $\mathcal{T}$ (scambi W e Z non $\mathcal{T}$ -invarianti)

SECONDA LEGGE TERMODINAMICA: Per processi macroscopici spesso non conservata
(strano: non coinvolgono interazioni deboli)

NUMERO FERMIONI:

CONSERVAZIONE: $(-1)^{\mathcal{N}_f}$ è conservato (sistema reagisce sempre allo stesso modo sotto parità)

SUPERSELEZIONE: Parità o disparità del numero di fermioni è superseletta: due sistemi $|\psi_{\mathcal{N}_p}\rangle$ e $|\psi_{\mathcal{N}_d}\rangle$ non si mescoleranno mai

5 Momento Angolare

MOMENTO ANGOLARE:

$$\mathbf{J}_{\text{tot}} = \sum_i (\mathbf{L}_i + \mathbf{s}_i) \quad i = \text{particella}$$

ALGEBRA:

$$\text{COMMUTATORI: } [J_i, J_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} J_k \quad [\mathbf{J}^2, J_i] = 0 \quad \forall i \quad [J_i, x_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} x_k \quad [J_i, p_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} p_k$$

COMPATIBILITÀ: $\forall i, J_i$ hermitiano e compatibile con $\mathbf{J}^2 \Rightarrow \exists$ base che diagonalizza $\mathbf{J}^2$ e, ad esempio, J_z

STRUTTURA DI GRUPPO: J_i rappresentano l'algebra $SO(3)$ (rotazioni 3D), con costanti di struttura ε_{ijk}

$$\text{OPERATORI AUSILIARI: } J_+ = J_x + iJ_y \quad J_- = J_x - iJ_y \quad \mathbf{J}^2 = J_- J_+ + J_z^2 + J_z$$

$$\text{COMMUTATORI: } [J_+, J_-] = 2J_z \quad [J_z, J_+] = J_+ \quad [J_z, J_-] = -J_-$$

QUANTIZZAZIONE DI J:

BASE: $|\psi_{j,m}\rangle \equiv |j, m\rangle$ scelta base di autostati simultanei di $\mathbf{J}^2$ e J_z

$\psi_{j,m}$ rappresenta j -esimo autostato per $\mathbf{J}^2$ e m -esimo autostato per J_z

$$\text{SPETTRO DI } \mathbf{J}^2: \quad \mathbf{J}^2 |j, m\rangle = j(j+1)\hbar^2 |j, m\rangle \quad \text{con } j \text{ intero o semintero } j \geq 0$$

$$\text{SPETTRO DI } J_z: \quad J_z |j, m\rangle = m\hbar |j, m\rangle \quad \text{con } m \text{ intero o semintero } -j \leq m \leq j \quad \forall j \Rightarrow$$

$$\forall j \quad \exists \quad 2j+1 \quad \psi_{j,m} \text{ al variare di } m \in [-j, j] \quad (\text{con passo intero a partire da } m = \pm j)$$

$$\text{OPERATORE DI INNALZAMENTO: } J_+ |j, m\rangle \propto |j, m+1\rangle \quad J_+ |j, j\rangle = 0 \quad J_+^N |j, m\rangle \propto |j, m+N\rangle$$

$$\text{OPERATORE DI ABBASSAMENTO: } J_- |j, m\rangle \propto |j, m-1\rangle \quad J_- |j, -j\rangle = 0 \quad J_-^N |j, m\rangle \propto |j, m-N\rangle$$

$$*\text{Seminteri: } \mathbb{Z} + \frac{1}{2} = \{\text{insieme dei seminteri}\} \quad \frac{\mathbb{Z}}{2} = \{\text{insieme degli interi e seminteri}\}$$

ELEMENTI DI MATRICE:

Unici elementi non nulli (in Convenzione Condon-Shortley):

$$J_z: \quad \langle j, m' | J_z | j, m \rangle = \delta_{m,m'} \quad \Rightarrow \quad J_z |j, m\rangle = m |j, m\rangle$$

$$J_x: \quad \langle j, m-1 | J_x | j, m \rangle = \frac{1}{2} \sqrt{(j+m)(j-m+1)}$$

$$\langle j, m+1 | J_x | j, m \rangle = \frac{1}{2} \sqrt{(j-m)(j+m+1)}$$

$$J_x |j, m\rangle = \frac{1}{2} \sqrt{(j-m)(j+m+1)} |j, m+1\rangle + \frac{1}{2} \sqrt{(j+m)(j-m+1)} |j, m-1\rangle$$

$$J_y: \quad \langle j, m-1 | J_y | j, m \rangle = \frac{i}{2} \sqrt{(j+m)(j-m+1)}$$

$$\langle j, m+1 | J_y | j, m \rangle = \frac{i}{2} \sqrt{(j-m)(j+m+1)}$$

$$J_y |j, m\rangle = \frac{i}{2} \sqrt{(j-m)(j+m+1)} |j, m+1\rangle + \frac{i}{2} \sqrt{(j+m)(j-m+1)} |j, m-1\rangle$$

$$J_+: \quad J_+ |j, m\rangle = \sqrt{(j-m)(j+m+1)} |j, m+1\rangle$$

$$J_-: \quad J_- |j, m\rangle = \sqrt{(j+m)(j-m+1)} |j, m-1\rangle$$

MOMENTO ANGOLARE ORBITALE:

$$\mathbf{L} = \hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \mathbf{r} \times \nabla = \left\{ L_x = -i\hbar(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y}) \quad , \quad L_y = -i\hbar(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z}) \quad , \quad L_z = -i\hbar(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x}) \right\}$$

$$\text{COORDINATE SFERICHE: } L_z = -\frac{\partial}{\partial \varphi} \quad \mathbf{L}^2 = -\left(\frac{1}{\sin(\theta)} \frac{\partial}{\partial \theta} (\sin(\theta) \frac{\partial}{\partial \theta}) + \frac{1}{\sin^2(\theta)} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right)$$

$$L_+ = e^{i\varphi} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot(\theta) \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \quad L_- = e^{-i\varphi} \left(-\frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot(\theta) \frac{\partial}{\partial \varphi} \right)$$

$$\text{EQUAZIONI AUTOVALORI: } \begin{cases} \hat{L}^2 \psi(r, \theta, \varphi) = \ell(\ell+1)\hbar^2 \psi(r, \theta, \varphi) \\ \hat{L}_z \psi(r, \theta, \varphi) = m\hbar \psi(r, \theta, \varphi) \end{cases}$$

$$\text{SOLUZIONE: } \psi(r, \theta, \varphi) = R(r) Y_{\ell, m}(\theta, \varphi) \quad \ell \in \mathbb{N} \text{ (intero } \geq 0), \quad m \in \mathbb{Z} \text{ (intero), } m \in [-\ell, \ell]$$

$$\text{ELEMENTI DI MATRICE } \langle \theta, \varphi | \ell, m \rangle = Y_{\ell, m}(\theta, \varphi)$$

$$\text{DISTRIBUZIONE ANGOLARE: } \mathcal{P} d\Omega = \left| \sum_i c_i Y_{(\ell, m)_i} \right|^2 \sin(\theta) d\theta d\varphi$$

POLINOMI DI LEGENDRE:

$$\text{EQUAZIONE DI LEGENDRE: } \left(\frac{d}{dx} \left((1-x^2) \frac{d}{dx} \right) + \ell(\ell+1) \right) y = 0$$

$$\text{SOLUZIONE: } P_\ell(x) = \frac{1}{2^\ell \ell!} \frac{d^\ell}{dx^\ell} ((x^2-1)^\ell)$$

$$\text{ORTONORMALIZZAZIONE: } \int_0^1 P_\ell(x) P_{\ell'}(x) dx = \frac{2}{2\ell+1} \delta_{\ell\ell'}$$

$$\text{ESEMPI: } P_0(x) = 1 \quad P_1(x) = x \quad P_2(x) = \frac{1}{2}(3x^2-1) \quad P_3(x) = \frac{1}{2}(4x^3-3x)$$

POLINOMI ASSOCIATI DI LEGENDRE:

$$P_{\ell,m}(x) = (1-x^2)^{m/2} \frac{d^m}{dx^m} P_{\ell}(x) = \frac{-1^{\ell}}{2^{\ell} \ell!} (1-x^2)^{m/2} \frac{d^{\ell+m}}{dx^{\ell+1}} (1-x^2)^{\ell}$$

$$\text{INDICE NEGATIVO: } P_{\ell,-m}(x) = (-1)^m \frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!} P_{\ell,m}$$

ARMONICHE SFERICHE:

$$Y_{\ell,m}(\theta, \varphi) = (-1)^{\frac{m+|m|}{2}} \sqrt{\frac{(2\ell+1)(\ell-|m|)!}{4\pi(\ell+|m|)!}} P_{\ell,|m|}(x) e^{im\varphi}$$

$$\text{CONIUGIO: } Y_{\ell,m}^* = (-1)^m Y_{\ell,-m} \Rightarrow Y_{\ell,-m}(\theta, \varphi) = (-1)^m Y_{\ell,m}^*(\theta, \varphi)$$

$$\text{PARITÀ: } \mathcal{P} Y_{\ell,m} = Y_{\ell,m}(\pi - \theta, \varphi + \pi) = (-1)^{\ell} Y_{\ell,m}(\theta, \varphi) \quad (\text{a parità definita})$$

$$\mathcal{P}_{xy} Y_{\ell,m} = Y_{\ell,m}(\theta, \varphi + \pi) = (-1)^m Y_{\ell,m}(\theta, \varphi) \quad \mathcal{P}_z Y_{\ell,m} = Y_{\ell,m}(\pi - \theta, \varphi) = (-1)^{\ell+m} Y_{\ell,m}(\theta, \varphi)$$

$$\text{ORTONORMALIZZAZIONE: } \int_0^{4\pi} Y_{\ell',m'}^*(\theta, \varphi) Y_{\ell,m}(\theta, \varphi) d\Omega = \delta(\ell, \ell') \delta(m, m')$$

NORMA: $Y_{\ell,m}$ automaticamente normalizzate se integrate su Ω (distribuzione angolare)

$Y_{\ell,m}$ hanno norma $\neq 1$ se trattati come coefficienti di autostati di spin $\Rightarrow$ da normalizzare

$$\text{ESEMPI: } Y_{0,0} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \quad Y_{1,0} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos(\theta) \quad Y_{1,\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin(\theta) e^{\pm i\varphi} \quad Y_{2,0} = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3 \cos^2(\theta) - 1)$$

COMPOSIZIONE MOMENTI ANGOLARI:

Si considera il sistema di due particelle con $\mathbf{J}_1$ e $\mathbf{J}_2$

$$\text{MOMENTO ANGOLARE TOTALE: } \mathbf{J} = \mathbf{J}_1 \otimes \mathbb{I} + \mathbb{I} \otimes \mathbf{J}_2 \equiv \mathbf{J}_1 + \mathbf{J}_2$$

AZIONE: $\mathbf{J}_1$ agisce sulla prima componente dello stato totale, $\mathbf{J}_2$ sulla seconda componente

$$\text{ALGEBRA: } [J_{1i}, J_{2j}] = 0 \quad [J_i, J_j] = i\epsilon_{ijk} J_k$$

BASE (I): $|j_1, m_1, j_2, m_2\rangle = |j_1, m_1\rangle \otimes |j_2, m_2\rangle$ autostati simultanei di $\mathbf{J}_1^2, J_{1z}, \mathbf{J}_2^2, J_{2z}$

$$\begin{aligned} \text{AUTOSTATI: } \mathbf{J}_1^2 |j_1, m_1, j_2, m_2\rangle &= j_1(j_1+1)\hbar^2 |j_1, m_1, j_2, m_2\rangle & \text{con } j_1 \in \frac{\mathbb{Z}}{2} \quad j_1 \geq 0 \\ J_{1z} |j_1, m_1, j_2, m_2\rangle &= m_1 \hbar |j_1, m_1, j_2, m_2\rangle & \text{con } m_1 \in \frac{\mathbb{Z}}{2} \quad -j_1 \leq m_1 \leq j_1 \\ \mathbf{J}_2^2 |j_1, m_1, j_2, m_2\rangle &= j_2(j_2+1)\hbar^2 |j_1, m_1, j_2, m_2\rangle & \text{con } j_2 \in \frac{\mathbb{Z}}{2} \quad j_2 \geq 0 \\ J_{2z} |j_1, m_1, j_2, m_2\rangle &= m_2 \hbar |j_1, m_1, j_2, m_2\rangle & \text{con } m_2 \in \frac{\mathbb{Z}}{2} \quad -j_2 \leq m_2 \leq j_2 \end{aligned}$$

NUMERO STATI: fissati $j_1, j_2 \quad \exists (2j_1+1)(2j_2+2)$ stati indipendenti

BASE (II): $|j_1, j_2, J, M\rangle$ autostati simultanei di $\mathbf{J}_1^2, \mathbf{J}_2^2, \mathbf{J}^2, J_z$

$$\begin{aligned} \text{AUTOSTATI: } \mathbf{J}_1^2 |j_1, j_2, J, M\rangle &= j_1(j_1+1)\hbar^2 |j_1, j_2, J, M\rangle & \text{con } j_1 \in \frac{\mathbb{Z}}{2} \quad j_1 \geq 0 \\ \mathbf{J}_2^2 |j_1, j_2, J, M\rangle &= j_2(j_2+1)\hbar^2 |j_1, j_2, J, M\rangle & \text{con } j_2 \in \frac{\mathbb{Z}}{2} \quad j_2 \geq 0 \\ \mathbf{J}^2 |j_1, j_2, J, M\rangle &= J(J+1)\hbar^2 |j_1, j_2, J, M\rangle & \text{con } J \in \frac{\mathbb{Z}}{2} \quad |j_1 - j_2| \leq J \leq j_1 + j_2 \\ J_z |j_1, j_2, J, M\rangle &= M \hbar |j_1, j_2, J, M\rangle & \text{con } M \in \frac{\mathbb{Z}}{2} \quad -J \leq M \leq J \quad M = m_1 + m_2 \end{aligned}$$

NUMERO STATI: fissati $j_1, j_2 \quad \exists (2j_1+1)(2j_2+2)$ stati indipendenti

RELAZIONE AUTOVALORI: fissati $j_1, j_2 \Rightarrow J$ può assumere i valori: $\{j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1, \dots, |j_1 - j_2|\}$
fissati $m_1, m_2 \Rightarrow M = m_1 + m_2$

CONVENZIONE DI CONDON-SHORTLEY: Relazioni tra basi fissate a meno di fasi, si fissano quindi:

- Massimi stati delle due basi identificati con coefficiente 1 (fissata fase globale relativa)
- Elementi di matrice di $J_{1-}, J_{2-}, J_- \in \mathbb{R}$ semidefiniti positivi (fasi relative interne al multipletto)
- Elementi di matrice $\langle j_1, j_2, J, M | J_{1z} | j_1, j_2, J+1, M \rangle \in \mathbb{R}$ semidefiniti positivi

CLEBSCH-GORDAN: Coefficienti dello sviluppo della base (I) in funzione della base (II)

$$\text{SVILUPPO: } |j_1, m_1, j_2, m_2\rangle = \sum_{J,M} |j_1, j_2, J, M\rangle \langle j_1, j_2, J, M | j_1, m_1, j_2, m_2\rangle$$

$$\text{COEFFICIENTI: } \langle j_1, j_2, J, M | j_1, m_1, j_2, m_2\rangle \quad (\text{sommando su } M, \neq 0 \Leftrightarrow M = m_1 + m_2)$$

$$(II) \text{ IN FUNZIONE DI } (I): |j_1, j_2, J, M\rangle = \sum_{m_1, m_2} |j_1, m_1, j_2, m_2\rangle \langle j_1, m_1, j_2, m_2 | j_1, j_2, J, M\rangle$$

$$\text{CONIUGATI: } \langle j_1, m_1, j_2, m_2 | j_1, j_2, J, M\rangle = \langle j_1, j_2, J, M | j_1, m_1, j_2, m_2\rangle^*$$

TABELLE: fissati j_1, j_2 si legge il coefficiente incrociando le due coppie $\{J, M\}$ e $\{m_1, m_2\}$

*Operatori Tensoriali:

PRODOTTO: $T \otimes W = \{T_{i_1 \dots i_n} \cdot W_{j_1 \dots j_n}\} \forall i, j$ (insieme di tutte le combinazioni possibili permesse)

PRODOTTO DIRETTO: $|a\rangle \in U \quad |b\rangle \in V \Rightarrow |a\rangle \otimes |b\rangle \in W$ spazio prodotto, con $\dim(W) = \dim(U) \cdot \dim(V)$

$$A|a\rangle \otimes B|b\rangle = (A \otimes B)(|a\rangle \otimes |b\rangle) = \begin{pmatrix} a_{11}B & a_{1n}B \\ a_{m1}B & a_{mn}B \end{pmatrix}(|a\rangle \otimes |b\rangle)$$

(espresso in base di W ottenuta come combinazione ordinata delle basi di U e V)

Proprietà: $B(b)(|a\rangle \otimes |b\rangle) = |a\rangle \otimes (B(b)|b\rangle), \quad |a\rangle \otimes (k|b\rangle) = k(|a\rangle \otimes |b\rangle)$

SOMMA: $T \oplus W = \{T, W\}$ (insieme dei singoli elementi)

5.1 Spin

Momento angolare intrinseco di una particella, privo di equivalente classico, quantizzato (intero o semintero)

FUNZIONE D'ONDA:

$\psi(x)\chi(s) = (\psi(x)_1, \dots, \psi(x)_{2s+1})$ vettore di $2s+1$ componenti corrispondenti a relativi valori di spin

Funzione d'onda di spin $\chi(s)$ agisce su spazio diverso dal domino di $\psi(x) \Rightarrow [\psi(x), \chi(s)] = 0, \quad [L, s] = 0$

Se H indipendente da spin, ma particella con spin $s \Rightarrow$ degenerazione $2s+1 \quad \forall$ autostato dell'energia

DISTRIBUZIONE ANGOLARE:

$\mathcal{P}d\Omega = \sum_s |\sum_i c_i Y_{(\ell,m)_i}|^2 \sin(\theta) d\theta d\varphi$ dove la somma su s si intende sulle varie funzioni d'onda di spin

ESPERIMENTO DI STERN-GERLACH -SG:

Flusso di atomi di Ag in regione con B_z : $H = -\mu \cdot \mathbf{B} = -gs \cdot \mathbf{B} \Rightarrow \mathbf{F} = -gs \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial z}$

Si ottiene su schermo atomi distribuite in due righe ben collimate $\Rightarrow \mathbf{s}$ è quantizzato con 2 valori possibili

SELETTORE DI SPIN: Bloccando un fascio si seleziona un singolo stato di spin (sull'asse z)

QUANTIZZAZIONE DIREZIONALE: $\mathbf{s}$ quantizzato per ogni asse separatamente con $[s_i, s_j] \neq 0$

$\forall$ filtro-SG con asse diverso è modificato stato: $SG_z^+(SG_x(SG_z^-(\psi))) \neq 0$

MATRICI DI PAULI:

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$\text{ALGEBRA: } \begin{cases} \sigma_i^2 = \mathbb{I} \quad \forall i \\ \sigma_i \sigma_j = -\sigma_j \sigma_i = i \varepsilon_{ijk} \sigma_k \quad \forall i \neq j \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} [\sigma_i, \sigma_j] = 2i \varepsilon_{ijk} \sigma_k \\ \{\sigma_i, \sigma_j\} = 2\delta_{ij} \mathbb{I} \end{cases} \Leftrightarrow \sigma_i \sigma_j = i \varepsilon_{ijk} \sigma_k + \delta_{ij} \mathbb{I}$$

PROPRIETÀ MATRICIALI: Determinante: $\det(\sigma_i) = -1$ Traccia: $\text{Tr}(\sigma_i) = 0$ Autovalori $\lambda_{\sigma_i} = \pm 1$

RAPPRESENTAZIONE: Rappresentano algebra del gruppo $SO(3)$

ESPOENZIALE: $e^{i\mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\sigma}} = \mathbb{I} \cos |\mathbf{v}| + i \frac{\mathbf{v}}{|\mathbf{v}|} \cdot \boldsymbol{\sigma} \sin |\mathbf{v}|$ ($\mathbf{v}$ costante)

PRODOTTO SCALARE: $\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{v} = \sum_{i=1}^3 \sigma_i v_i$

SPIN 1/2:

AUTOVALORI: $j_s = \frac{1}{2} \quad m = \pm \frac{1}{2} \Rightarrow \mathbf{s}^2 |\psi\rangle = \frac{3}{4} \hbar^2 |\psi\rangle \quad s_z |\psi\rangle = \pm \frac{1}{2} \hbar |\psi\rangle$

OPERATORE (ELEMENTI DI MATRICE): $s_i = \frac{\hbar}{2} \sigma_i \Rightarrow \langle \frac{1}{2}, m' | s_i | \frac{1}{2}, m \rangle = \frac{\hbar}{2} (\sigma_i)_{m', m}$

OPERATORI DI SPIN-FLIP: Innalzamento: $s_+ = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$ Abbassamento: $s_- = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$

BASE (AUTOSTATI DI s_z): *Spin up*: $|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = |\uparrow\rangle$ *Spin down*: $|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = |\downarrow\rangle$

AUTOSTATI DI s_x : $s_x |x_+\rangle = \frac{1}{2} |x_+\rangle, \quad s_x |x_-\rangle = -\frac{1}{2} |x_-\rangle$ con $|x_+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad |x_-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$

AUTOSTATI DI s_y : $s_y |y_+\rangle = \frac{1}{2} |y_+\rangle, \quad s_y |y_-\rangle = -\frac{1}{2} |y_-\rangle$ con $|y_+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}, \quad |y_-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix}$

STATI MISTI: $\langle s_i \rangle = \frac{1}{2} (\mathcal{P}(s_i = \frac{1}{2}) - \mathcal{P}(s_i = -\frac{1}{2})) = \frac{1}{2} \xi_i$ dove $x \leftrightarrow 1, y \leftrightarrow 2, z \leftrightarrow 3$

COMPOSIZIONE: sistema a due particelle $j_{s1} = j_{s2} = \frac{1}{2}$

BASE (I): $\{ |\uparrow\rangle |\uparrow\rangle, |\uparrow\rangle |\downarrow\rangle, |\downarrow\rangle |\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle |\downarrow\rangle \}$

AUTOVALORI DI $\mathbf{s}_{tot}^2$: $s_{tot} = \{1, 0\} \Rightarrow \begin{cases} \mathbf{s}_{tot}^2 |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 1, M\rangle = 2\hbar^2 |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 1, M\rangle \\ \mathbf{s}_{tot}^2 |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0, M\rangle = 0 \end{cases}$

STATI DI TRIPLETTO: Autostati con $s_{tot} = 1$ e $m_{tot} = \{1, 0, -1\}$ ("spin parallelo")
 $|1, 1\rangle = |\uparrow\rangle |\uparrow\rangle \quad |1, 0\rangle = \frac{|\uparrow\rangle |\downarrow\rangle + |\downarrow\rangle |\uparrow\rangle}{\sqrt{2}} \quad |1, -1\rangle = |\downarrow\rangle |\downarrow\rangle$

STATI DI SINGOLETTO: Autostati con $s_{tot} = 0$ e $m_{tot} = 0$ ("spin antiparallelo")
 $|0, 0\rangle = \frac{|\uparrow\rangle |\downarrow\rangle - |\downarrow\rangle |\uparrow\rangle}{\sqrt{2}}$

BASE (II): $\{ |1, 1\rangle, |1, 0\rangle, |1, -1\rangle, |0, 0\rangle \}$

OPERATORI: Base I: $\mathbf{s}^2 = (\mathbf{s}(1) + \mathbf{s}(2))^2 = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} \quad s_z = s_z(1) + s_z(2) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$
 Base II: $\mathbf{s}^2 = (\mathbf{s}(1) + \mathbf{s}(2))^2 = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad s_z = s_z(1) + s_z(2) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$

DIREZIONE GENERICA: $j_s = \frac{1}{2}$ versore normale: $\mathbf{n} = (\sin(\theta) \cos(\varphi), \sin(\theta) \sin(\varphi), \cos(\theta))$

OPERATORE $\mathbf{s} \cdot \mathbf{n}$: $\mathbf{s} \cdot \mathbf{n} = \frac{1}{2} \hbar \begin{pmatrix} \cos(\theta) & \sin(\theta) e^{-i\varphi} \\ \sin(\theta) e^{i\varphi} & -\cos(\theta) \end{pmatrix}$ proiezione dello spin in direzione $\mathbf{n}$

AUTOSTATI DI $\mathbf{s} \cdot \mathbf{n}$: $\mathbf{s} \cdot \mathbf{n} |\mathbf{n}_+\rangle = \frac{1}{2} |\mathbf{n}_+\rangle = \frac{1}{2} \hbar \begin{pmatrix} \cos(\frac{\theta}{2}) e^{-i\frac{\varphi}{2}} \\ \sin(\frac{\theta}{2}) e^{i\frac{\varphi}{2}} \end{pmatrix} \quad \mathbf{s} \cdot \mathbf{n} |\mathbf{n}_-\rangle = -\frac{1}{2} |\mathbf{n}_-\rangle = -\frac{1}{2} \hbar \begin{pmatrix} \sin(\frac{\theta}{2}) e^{-i\frac{\varphi}{2}} \\ -\cos(\frac{\theta}{2}) e^{i\frac{\varphi}{2}} \end{pmatrix}$

CAMBIO DI BASE: $\begin{cases} |\uparrow\rangle = \cos(\frac{\theta}{2}) e^{i\frac{\varphi}{2}} |\mathbf{n}_+\rangle + \sin(\frac{\theta}{2}) e^{i\frac{\varphi}{2}} |\mathbf{n}_-\rangle \\ |\downarrow\rangle = \sin(\frac{\theta}{2}) e^{-i\frac{\varphi}{2}} |\mathbf{n}_+\rangle - \cos(\frac{\theta}{2}) e^{-i\frac{\varphi}{2}} |\mathbf{n}_-\rangle \end{cases} \Rightarrow \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}_z = \begin{pmatrix} \alpha \cos(\frac{\theta}{2}) e^{i\frac{\varphi}{2}} + \beta \sin(\frac{\theta}{2}) e^{-i\frac{\varphi}{2}} \\ \alpha \sin(\frac{\theta}{2}) e^{i\frac{\varphi}{2}} - \beta \cos(\frac{\theta}{2}) e^{-i\frac{\varphi}{2}} \end{pmatrix}_{\mathbf{n}}$

$\mathbf{n}$ GENERICO: se in stato $\mathbf{s}/\mathbf{n} \Rightarrow \psi = |\mathbf{n}_+\rangle$ (con $\mathbf{s} \cdot \mathbf{n}$ calcolata opportunamente)

SPIN E STATISTICA:

PARTICELLE CLASSICAMENTE IDENTICHE:

Etichettabili (distinguibili) solo in base a evoluzione temporale (traiettoria)

PARICELLE QUANTISTICAMENTE IDENTICHE:

Ogni numero quantico uguale, data indeterminazione $\nexists$ traiettoria $\Rightarrow$ non etichettabili

SCAMBIO DI PARTICELLE IDENTICHE:

Da indistinguibilità stato non può cambiare sotto scambio: $\psi(q_1, q_2) = e^{i\alpha} \psi(q_2, q_1)$

Compiendo due scambi funzione d'onda va in se stessa $\Rightarrow$ fase deve annullarsi: $e^{2i\alpha} = 1 \Rightarrow e^{i\alpha} = \pm 1$

BOSONI:

Particella con spin intero $\Rightarrow \psi$ simmetrica per scambio ($e^{i\alpha} = 1$)

ψ simmetrica per scambio $\Leftrightarrow$ obbedisce a statistica Bose-Einstein (dimostrato relativisticamente)

FERMIONI:

Particella con spin semintero $\Rightarrow \psi$ antisimmetrica per scambio ($e^{i\alpha} = -1$)

ψ antisimmetrica per scambio $\Leftrightarrow$ obbedisce a statistica Fermi-Dirac (dimostrato relativisticamente)

SCAMBIO DI N PARTICELLE IDENTICHE

Scambiando tutte le coppie di particelle identiche di un sistema di N particelle $\mathcal{S}\psi = (-1)^{n_{\text{fermioni}}} \psi$

SCAMBIO DI 2 FERMIONI: $\mathcal{S} = \mathcal{P}_1 \mathcal{P}_2 (-1)^\ell (-1)^{s_{tot}+1} \equiv -1$

(se $s = \frac{1}{2}$: singoletto antisimmetrico per scambio, tripletto simmetrico)

SCAMBIO DI 2 BOSONI: $\mathcal{S} = \mathcal{P}_1 \mathcal{P}_2 (-1)^\ell (-1)^s \equiv +1$

SCAMBIO DI NUCLEI IDENTICI: Nucleo composto da N nucleoni (fermioni) $\Rightarrow \mathcal{S}(\psi) = (-1)^N \psi$

STATO DI N BOSONI:

$$\psi(q_1, \dots, q_N) = \frac{\prod_i N_i!}{N!} \sum_{\text{scambi}} \psi_{s_1}(q_1) \dots \psi_{s_m}(q_N) \quad s_i = \text{stato} \quad N_i = \text{numero particelle in } s_i$$

Funzione totalmente simmetrica per scambio di due particelle

STATO DI N FERMIONI:

$$\psi(q_1, \dots, q_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \det \begin{pmatrix} \psi_{s_1}(q_1) & \dots & \psi_{s_1}(q_N) \\ \vdots & & \vdots \\ \psi_{s_N}(q_1) & \dots & \psi_{s_N}(q_N) \end{pmatrix} \quad s_i = \text{stato} \quad N_i = \text{numero particelle in } s_i$$

Funzione totalmente antisimmetrica per scambio di due particelle

PRINCIPIO DI ESCLUSIONE DI PAULI:

Se due fermioni si trovano nello stesso stato ψ si annulla: $q_i = q_j \vee s_i = s_j \Rightarrow \det_{\text{slater}} = 0 \Rightarrow \psi = 0$
 $\Rightarrow$ due fermioni non possono mai avere tutti i numeri quantici uguali

5.2 Rotazioni

SPIN NULO ($s = 0$):

OPERATORE: $R(\boldsymbol{\omega}) = e^{i\mathbf{L}\cdot\boldsymbol{\omega}/\hbar}$ generatore infinitesimale delle rotazioni (angolo $|\boldsymbol{\omega}|$, direzione $\boldsymbol{\omega}$)

FUNZIONE D'ONDA: $R(\boldsymbol{\omega})\psi(\mathbf{r}) = \psi'(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{L}\cdot\boldsymbol{\omega}/\hbar}\psi(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r} + \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{r}) + o(\omega^2)$

in seguito a rotazione non cambia valore della funzione in $\mathbf{r}$ ma sua forma funzionale

ARMONICHE SFERICHE: $\psi(\mathbf{r}) = \sum_{\ell,m} R_{\ell,m}(r)Y_{\ell,m}(\theta, \varphi) \Rightarrow \psi'(\mathbf{r}) = \sum_{\ell,m} R_{\ell,m}(r)e^{i\mathbf{L}\cdot\boldsymbol{\omega}/\hbar}Y_{\ell,m}(\theta, \varphi)$

MATRICE DI ROTAZIONE: $e^{i\mathbf{L}\cdot\boldsymbol{\omega}/\hbar}Y_{\ell,m}(\theta, \varphi) = \sum_{m'=-\ell}^{\ell} D_{\ell,m',m}(\boldsymbol{\omega})Y_{\ell,m'}(\theta, \varphi)$

$$D_{\ell,m',m}(\boldsymbol{\omega}) \equiv \langle \ell, m' | e^{i\mathbf{L}\cdot\boldsymbol{\omega}/\hbar} | \ell, m \rangle = \int Y_{\ell,m'}^* e^{i\mathbf{L}\cdot\boldsymbol{\omega}/\hbar} Y_{\ell,m} d\Omega = (e^{i\mathbf{L}\cdot\boldsymbol{\omega}/\hbar})_{m',m}$$

SPIN NON NULO ($s \neq 0$):

OPERATORE: $R(\boldsymbol{\omega}) = e^{i\mathbf{J}\cdot\boldsymbol{\omega}/\hbar} = e^{i(\mathbf{L}+\mathbf{s})\cdot\boldsymbol{\omega}/\hbar}$ $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{s}$ ($[L_i, s_j] = 0 \forall i, j$)

FUNZIONE D'ONDA: $R(\boldsymbol{\omega})\psi(\mathbf{r}) = e^{i(\mathbf{L}+\mathbf{s})\cdot\boldsymbol{\omega}/\hbar}\psi(\mathbf{r})$ $\psi(\mathbf{r})$ è vettore di $2s + 1$ componenti

$e^{i\mathbf{L}\cdot\boldsymbol{\omega}/\hbar}$ agisce su dipendenza da $\mathbf{r}$ delle componenti

$e^{i\mathbf{s}\cdot\boldsymbol{\omega}/\hbar}$ agisce sullo spazio di spinore con elementi di matrice $\psi'_{\sigma} = \sum_{\sigma'} (e^{i\mathbf{s}\cdot\boldsymbol{\omega}/\hbar})_{\sigma,\sigma'} \psi_{\sigma'}$

ARMONICHE SFERICHE: $\psi(\mathbf{r}) = \sum_{\ell,m} R_{\ell,m}(r)Y_{\ell,m}(\theta, \varphi) \Rightarrow \psi'(\mathbf{r}) = \sum_{\ell,m} R_{\ell,m}(r)e^{i\mathbf{L}\cdot\boldsymbol{\omega}/\hbar}Y_{\ell,m}(\theta, \varphi)$

MATRICE DI ROTAZIONE: $R'_{\ell,m'} = \sum_m R_{\ell,m} D_{\ell,m',m} \Rightarrow \psi'(\mathbf{r}) = \sum_{\ell,m'} R'_{\ell,m'}(\mathbf{r}, \boldsymbol{\omega}) Y_{\ell,m'}(\theta, \varphi)$

SPIN 1/2:

FUNZIONE D'ONDA: $R(\boldsymbol{\omega})\psi(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{s}\cdot\boldsymbol{\omega}}\psi(\mathbf{r}) = e^{\frac{i}{2}\boldsymbol{\omega}\cdot\boldsymbol{\sigma}}\psi(\mathbf{r})$ (con $\boldsymbol{\omega} = \omega\mathbf{n}$)

MATRICE DI ROTAZIONE: $R(\boldsymbol{\omega}) = \cos(\frac{\omega}{2}) + i\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma} \sin(\frac{\omega}{2})$

$$\text{ASSI: (unitari)} \quad R_x(\omega) = \begin{pmatrix} \cos(\frac{\omega}{2}) & i\sin(\frac{\omega}{2}) \\ i\sin(\frac{\omega}{2}) & \cos(\frac{\omega}{2}) \end{pmatrix} \quad R_y(\omega) = \begin{pmatrix} \cos(\frac{\omega}{2}) & \sin(\frac{\omega}{2}) \\ -\sin(\frac{\omega}{2}) & \cos(\frac{\omega}{2}) \end{pmatrix} \quad R_z(\omega) = \begin{pmatrix} e^{i\omega/2} & 0 \\ 0 & e^{-i\omega/2} \end{pmatrix}$$

$$\text{ANGOLI DI EULERO: } D^{1/2} = R(\alpha, \beta, \gamma) = R_z(\gamma)R_y(\beta)R_z(\alpha) = \begin{pmatrix} e^{i(\alpha+\gamma)/2} \cos(\frac{\beta}{2}) & e^{-i(\alpha-\gamma)/2} \sin(\frac{\beta}{2}) \\ -e^{i(\alpha-\gamma)/2} \sin(\frac{\beta}{2}) & e^{-i(\alpha+\gamma)/2} \cos(\frac{\beta}{2}) \end{pmatrix}$$

$$\omega = 2\pi: U_x(2\pi) = U_y(2\pi) = U_z(2\pi) = -\mathbb{I} \Rightarrow |\psi\rangle \text{ cambia segno ruotando di } 2\pi$$

SPIN $N/2$ (COMPOSTO):

BASE: $N + 1$ combinazioni degli spinori di base canonica, totalmente simmetriche per scambio di spinori

MATRICE DI ROTAZIONE SU SINGOLO SPIN: $D^{1/2}$ nella base prima costruita, analoga a quella costruita con gli angoli di eulero

MATRICE DI ROTAZIONE COMPLESSIVA: $D^{N/2} = \prod_{i=1}^N D_i^{1/2}$

SPINORI:

$SU(2)$ come rappresentazione proiettiva del gruppo $SO(3)$: $\forall \mathbf{v} = (\alpha, \beta, \gamma) \in SO(3) \exists \mathbf{w} \in SU(2)$

$|\psi\rangle$ con spin semintero $\Rightarrow |\psi\rangle$ antisimmetrica sotto inversioni: $R_i(2\pi) = -\mathbb{I} \Rightarrow |\psi\rangle \leftrightarrow \text{spinore}$

$|\psi\rangle$ con spin intero $\Rightarrow |\psi\rangle$ simmetrica sotto inversioni: $R_i(2\pi) = \mathbb{I} \Rightarrow |\psi\rangle \leftrightarrow \text{tensore}$

6 Equazione di Schrödinger tridimensionale

PROBLEMA A DUE CORPI:

HAMILTONIANA: $H = -\frac{\hbar^2}{2m_1}\nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_2}\nabla_2^2 + V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$

CAMBIO DI VARIABILI: Posizione relativa: $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$

Posizione del centro di massa: $\mathbf{R} = \frac{m_1\mathbf{r}_1+m_2\mathbf{r}_2}{m_1+m_2}$

Massa ridotta: $\mu = \frac{m_1m_2}{m_1+m_2}$

HAMILTONIANA SEPARATA: $H = -\frac{\hbar^2}{2(m_1+m_2)}\nabla_{\mathbf{R}}^2 - \frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla_{\mathbf{r}}^2 + V(\mathbf{r}) \Rightarrow$ cerco soluzione $\psi = \Psi(\mathbf{R})\Phi(\mathbf{r})$

EQUAZIONE DI SCHRÖDINGER RELATIVA: $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Phi(\mathbf{r}) = H_{\mathbf{r}}\Phi(\mathbf{r}) = \left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla_{\mathbf{r}}^2 + V(\mathbf{r})\right)\Phi(\mathbf{r})$
moto di singola particella con massa μ in potenziale $V(\mathbf{r})$

MOTO IN CAMPO CENTRALE:

HAMILTONIANA: $H = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(r) = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}(r^2\frac{\partial}{\partial r}) - \frac{1}{r^2}\hat{L}^2\right) + V(r)$ (con $r = |\mathbf{r}|$)

EQUAZIONE DI SCHRÖDINGER: $\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\mathbf{r}) = (V(r) - E)\psi(\mathbf{r})$

SEPARAZIONE DELLE VARIABILI: $\psi(\mathbf{r}) = R(r)\Phi(\theta, \varphi) \Rightarrow \begin{cases} \frac{1}{\Phi(\theta, \varphi)}\hat{L}^2\Phi(\theta, \varphi) = \lambda \\ \left(\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}(r^2\frac{\partial}{\partial r}) + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V(r)) - \frac{\lambda}{r^2}\right)R(r) = 0 \end{cases}$

SOLUZIONE ANGOLARE: $\Phi(\theta, \varphi) = Y_{\ell, m}(\theta, \varphi)$ $\lambda = \ell(\ell + 1)$

SOLUZIONE RADIALE: equazione 1D: variabile: $rR_{\ell}(r)$; potenziale efficace: $V_{eff}(r) = \frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2mr^2} + V(r)$

$$\frac{d}{dr^2}(rR_{\ell}(r)) = \frac{2m}{\hbar^2}\left[\frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2mr^2} + V(r) - E\right](rR_{\ell}(r)) \quad (7)$$

NORMALIZZAZIONE: $\int_0^{\infty} r^2 |R(r)|^2 dr = 1$

DOMINIO: particella su semiretta $r \in [0, \infty[$ con in potenziale $\begin{cases} V(r \leq 0) = \infty \\ V(r > 0) = V_{eff} \end{cases}$

REGOLARITÀ: $rR(0) = 0$

AUTOSTATI: discreti e non degeneri $\Rightarrow$ numero quantico principale n numera autovalori

NUMERI QUANTICI: stato $|\psi\rangle$ univocamente determinato da tre numeri quantici $\{n, \ell, m\}$ (principale, angolare, azimutale) associati agli osservabili massimali $\{E, L^2, L_z\}$

6.1 Soluzione Radiale libera (Onde Sferiche)

EQUAZIONE RADIALE:

$$\left(\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}(r^2\frac{\partial}{\partial r}) + k^2 - \frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{r^2}\right)R(r) = 0 \quad k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}E \quad (\text{cioè } V(r) = 0)$$

SOLUZIONE:

SOLUZIONE PER $\ell = 0$: regolare: $R_0 = 2\frac{\sin(kr)}{r}$ singolare: $R_0 = 2\frac{\cos(kr)}{r}$

SOLUZIONE ITERATIVA: $R_{\ell} = r^{\ell}\rho_{\ell} \Rightarrow \rho'_{\ell} = r\rho_{\ell+1}$

SOLUZIONE GENERALE: regolare: $R_{\ell} = (-1)^{\ell}\frac{2}{k^{\ell}}r^{\ell}\left(\frac{1}{r}\frac{d}{dr}\right)^{\ell}\frac{\sin(kr)}{r} = \sqrt{\frac{2\pi k}{r}}J_{\ell+1/2}(kr) = 2kj_{\ell}(kr)$
singolare: $R_{\ell} = (-1)^{\ell}\frac{2}{k^{\ell}}r^{\ell}\left(\frac{1}{r}\frac{d}{dr}\right)^{\ell}\frac{\cos(kr)}{r} = \sqrt{\frac{2\pi k}{r}}N_{\ell+1/2}(kr) = 2kn_{\ell}(kr)$

SOLUZIONE (HENKEL): onde in espansione: $R_{k, \ell}^{(I)} = 2kh_{\ell}^{(I)}(kr)$

onde in contrazione: $R_{k, \ell}^{(II)} = 2kh_{\ell}^{(II)}(kr)$

ANDAMENTO ASINTOTICO:

$$\lim_{r \rightarrow 0} R_{\ell} \sim \frac{2k^{\ell+1}r^{\ell}}{(2\ell+1)!!}(1 + o(r))$$

$$\lim_{r \rightarrow 0} R_{k, \ell}^{(I)} \sim \frac{1}{kr}e^{i(kr - (\ell+1)\pi/2)}$$

$$\lim_{r \rightarrow 0} R_{k, \ell}^{(II)} \sim \frac{1}{kr}e^{-i(kr - (\ell+1)\pi/2)}$$

ONDE PIANE:

$[H, \hat{\mathbf{p}}] = 0 \Rightarrow$ utilizzabile base di autostati dell'impulso $\Rightarrow$ onde piane soluzione: $\psi(r) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$
 $[\hat{\mathbf{p}}, \hat{\mathbf{L}}] \neq 0 \Rightarrow$ se impulso nei massimali momento angolare non è ben definito

CAMBIO DI BASE: possibile passare da un insieme massimale all'altro proiettando $\{\theta, \varphi\} \leftrightarrow \{\mathbf{k}, \mathbf{r}\}$
 $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = 4\pi \sum_{\ell=0}^{\infty} r^{\ell} j_{\ell}(kr) \sum_{m=-\ell}^{\ell} Y_{\ell,m}(\hat{r}) Y_{\ell,m}^*(\hat{k}) \quad \text{con } \hat{r} = (\theta_r, \varphi_r) \quad \hat{k} = (\theta_k, \varphi_k)$
 $e^{ikz} = e^{ikr \cos(\theta)} = \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) i^{\ell} j_{\ell}(kr) P_{\ell}(\cos(\theta))$

ARMONICHE CILINDRICHE (FUNZIONI DI BESSEL):

EQUAZIONE DI BESSEL: $x^2 \frac{d^2 y}{dx^2} + x \frac{dy}{dx} + (x^2 - \ell^2)y = 0$

FUNZIONI DI BESSEL: $J_{\ell}(x) = \left(\frac{x}{2}\right)^{\ell} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n (x/2)^{2n}}{n! \Gamma(\ell+n+1)}$ (soluzioni dell'equazione)

FUNZIONI DI NEUMANN: $N_{\ell}(x) = \frac{J_{\ell}(x) \cos(\ell\pi) - J_{-\ell}(x)}{\sin(\ell\pi)}$ (soluzioni dell'equazione)

FUNZIONI DI HENKEL: $H_{\ell}^{(I)}(x) = J_{\ell}(x) + iN_{\ell}(x) \quad H_{\ell}^{(II)}(x) = J_{\ell}(x) - iN_{\ell}(x)$

FUNZIONI SFERICHE:

Soluzioni dell'equazione di Bessel di ordine semintero $\Rightarrow$ esprimibili in termini di funzioni elementari

BESSEL SFERICHE: $j_{\ell}(x) = \sqrt{\frac{\pi}{2x}} J_{\ell+1/2}(x) = (-1)^{\ell} x^{\ell} \left(\frac{1}{x} \frac{d}{dx}\right)^{\ell} \frac{\sin(x)}{x}$

ANDAMENTO ASINTOTICO A 0: $j_{\ell}(x) \sim \frac{x^{\ell}}{(2\ell+1)!!}$

ANDAMENTO ASINTOTICO A ∞ : $j_{\ell}(x) \sim \frac{1}{x} \cos(x - \frac{(\ell+1)\pi}{2})$

NEUMANN SFERICHE: $n_{\ell}(x) = \sqrt{\frac{\pi}{2x}} N_{\ell+1/2}(x) = (-1)^{\ell+1} \sqrt{\frac{\pi}{2x}} J_{-\ell-1/2}(x) = -(-1)^{\ell} x^{\ell} \left(\frac{1}{x} \frac{d}{dx}\right)^{\ell} \frac{\cos(x)}{x}$

ANDAMENTO ASINTOTICO A 0: $n_{\ell}(x) \sim \frac{(2\ell-1)!!}{x^{\ell+1}}$

ANDAMENTO ASINTOTICO A ∞ : $j_{\ell}(x) \sim \frac{1}{x} \sin(x - \frac{(\ell+1)\pi}{2})$

HENKEL SFERICHE: $h_{\ell}^{(I)}(x) = j_{\ell}(x) + in_{\ell}(x) \quad h_{\ell}^{(II)}(x) = j_{\ell}(x) - in_{\ell}(x)$

ANDAMENTO ASINTOTICO A ∞ : $h_{\ell}^{(I)}(x) \sim \frac{1}{x} e^{i(x-(\ell+1)\pi/2)} \quad h_{\ell}^{(II)}(x) \sim \frac{1}{x} e^{-i(x-(\ell+1)\pi/2)}$

ESEMPLI: $j_0(x) = \frac{\sin(x)}{x} \quad j_1(x) = \frac{\sin(x)}{x^2} - \frac{\cos(x)}{x} \quad n_0(x) = -\frac{\cos(x)}{x} \quad n_1(x) = -\frac{\cos(x)}{x^2} - \frac{\sin(x)}{x}$

6.2 Stati legati buca tridimensionale**POTENZIALE:**

$$\begin{cases} V(r) = -V_0 & r \leq a \quad (I) \\ V(r) = 0 & r > a \quad (II) \end{cases}$$

EQUAZIONE DI SCHRÖDINGER:

$$\begin{cases} (I) \quad R'' + \frac{2}{r}R' + (K_i^2 - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2})R = 0 & K_i^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(E + V_0) > 0 \quad (K_i \text{ reale}) \\ (II) \quad R'' + \frac{2}{r}R' + (K_e^2 - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2})R = 0 & K_e^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(E) < 0 \quad (K_e \text{ immaginario}) \end{cases}$$

SOLUZIONE:

Considerati solo stati legati: $-V_0 < E < 0$

$$\begin{cases} (I) \quad R_{\ell}(r) = A j_{\ell}(K_i r) & (\text{da } R(0) = 0) \\ (II) \quad R_{\ell}(r) = B h_{\ell}^{(I)}(K_e r) & (\text{da normalizzabilità}) \end{cases} \Rightarrow \frac{K_e h_{\ell}^{(I)'}(K_e a)}{h_{\ell}^{(I)}(K_e r)} = \frac{K_i j_{\ell}'(K_i a)}{j_{\ell}(K_i a)}$$

AUTOSTATI: fissato ℓ , individuati da relazione tra K_i e K_e

CASO $\ell = 0$:

autostati da intersezioni di $\begin{cases} \xi \cot(\xi) = -\eta \\ \xi^2 + \eta^2 = \frac{2mV_0 a^2}{\hbar^2} \end{cases} \quad \text{con } \xi = K_i a, \quad \eta = -iK_e a \quad (\text{soluzione analoga a buca 1D})$

NUMERO STATI: $\exists n$ stati legati $\Leftrightarrow \frac{(2n-1)\pi}{2} < \sqrt{\frac{2ma^2V_0}{\hbar^2}} \leq \frac{2n+1\pi}{2}$

NESSUNO STATO LEGATO: $\sqrt{\frac{2ma^2V_0}{\hbar^2}} \leq \frac{\pi}{2} \Rightarrow \nexists$ stato legato

causa indeterminazione su tutte le componenti di $\mathbf{p} \Rightarrow E_k \propto a$

6.3 Atomo di Idrogeno

HAMILTONIANA:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - \frac{e^2}{r} \quad m = \frac{m_p m_e}{m_p + m_e} \simeq m_e$$

AUTOVALORI DELL'ENERGIA:

$$E_n = -\frac{me^4}{2\hbar^2 n^2} = -\frac{e^2}{2n^2 r_B} \quad (8)$$

RAGGIO DI BOHR: $r_B = \frac{\hbar^2}{me^2} \simeq 5.291 \cdot 10^{-11} \text{m}$

NUMERI QUANTICI: Principale: $n \in \mathbb{N} \quad n > 0$

Angolare: $\ell \in \mathbb{N} \quad \ell \in [0, n-1]$

Azimutale: $m \in \mathbb{N} \quad m \in [-\ell, \ell]$

DEGENERAZIONE: n -esimo livello ha $n^2 = \sum_{\ell=0}^{n-1} (2\ell+1)$ degenerazioni

FUNZIONE D'ONDA RADIALE:

$$R_{n,\ell} = C_{n,\ell} \rho^\ell e^{-\rho/2} L_{n+\ell}^{2\ell+1}(\rho) \quad C_{n,\ell} = -\frac{2}{n^2} \left(\frac{\hbar^2}{me^2}\right)^{-3/2} \sqrt{\frac{(n-\ell-1)!}{((n+\ell)!)^3}} \quad \rho = \frac{2rme^2}{\hbar^2 n} = \frac{2r}{nr_B}$$

ANDAMENTO ASINTOTICO: $R_{n,\ell}(r \rightarrow 0) \sim r^\ell \quad R_{n,\ell}(r \rightarrow \infty) \sim e^{-\frac{r}{nr_B}}$

ESEMPI: $R_{1,0}(r) = 2r_B^{-3/2} e^{-r/r_B} \quad R_{2,0}(r) = \frac{1}{2\sqrt{2}} r_B^{-3/2} (2 - \frac{r}{r_B}) e^{-r/(2r_B)} \quad R_{2,1}(r) = \frac{1}{2\sqrt{62}} r_B^{-3/2} \frac{r}{r_B} e^{-r/(2r_B)}$

FUNZIONE D'ONDA COMPLESSIVA:

$$\psi_{n,\ell,m} = R_{n,\ell}(r) Y_{\ell,m}(\theta, \varphi)$$

PARITÀ:

$$\mathcal{P}\psi_{n,\ell,m} = (-1)^\ell \mathcal{P}(e^-) \mathcal{P}(p^+)$$

ATOMI IDROGENOIDI:

Atomo composto da un singolo e^- e nucleo con carica $Z|e|$ (con potenziale coulombiano)

Soluzione individuata per atomo di idrogeno resta valida per sistema idrogenoide con sostituzione $e^2 \rightarrow Ze^2$

EFFETTI RELATIVISTICI:

$$\sqrt{\langle p^2 \rangle} \sim \frac{me^2}{\hbar} \Rightarrow v \sim \frac{p}{m} \simeq \frac{e^2}{\hbar} \simeq \frac{c}{137} \ll c \Rightarrow \text{effetti relativistici trascurabili}$$

POLINOMI DI LAGUERRE:

$$\text{FUNZIONE GENERATRICE: } G(x, s) = \frac{e^{-xs/(1-s)}}{1-s} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{L_n(x)}{n!} s^n$$

$$\text{POLINOMI: } L_n(x) = \frac{e^x}{n!} \frac{d^n}{dx^n} (e^{-x} x^n) \quad n \in \mathbb{N}$$

$$\text{POLINOMI ASSOCIATI DI LAGUERRE: } L_n^p(x) = \frac{d^p}{dx^p} L_n(x) = \frac{e^x x^{-p}}{n!} \frac{d^n}{dx^n} (e^{-x} x^{n+p})$$

$$\text{GENERATRICE DEGLI ASSOCIATI: } G_p(x, s) = \frac{(-s)^p e^{-xs/(1-s)}}{(1-s)^{p+1}} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{L_n^p(x)}{n!} s^n$$

6.4 Oscillatore Armonico Tridimensionale

HAMILTONIANA:

$$V(x) = \frac{1}{2} m \omega^2 \mathbf{r}^2 \Rightarrow H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 \mathbf{r}^2 = \sum_{i=1}^3 \frac{p_i^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 r_i^2 \quad (\text{separabile})$$

EQUAZIONE DI SCHRÖDINGER:

$$\psi_i'' = \frac{2m}{\hbar^2} (E - \frac{1}{2} m \omega^2 r_i^2) \psi_i \quad \text{per ogni componente } (i = x, y, z)$$

SOLUZIONE:

$$\psi_i n = C_n H_n(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} r_i) e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} r_i^2} \quad C_n = \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{1/4} \left(\frac{1}{2^n n!}\right)^{1/2} \quad \text{per ogni componente } (i = x, y, z)$$

AUTOVALORI DELL'ENERGIA:

$$E_n = \omega \hbar \left(n + \frac{3}{2}\right) \quad n = n_x + n_y + n_z \in \mathbb{N} \quad (n_i \text{ relativi a autovalori di singola } H_i \text{ separata})$$

DEGENERAZIONE: del livello n è $\binom{n+2}{n} = \frac{(n+1)(n+2)}{2}$

PARITÀ: $\mathcal{P}(\psi_n) = (-1)^n \psi_n$

***Degenerazione Generica:**

numero di modi per suddividere n in m interi: $\mathcal{N} = \binom{n+m-1}{n} = \binom{n+m-1}{m-1}$

PROPRIETÀ ANGOLARI:

$\exists$ base simultanea di autovettori di H e $\mathbf{L}^2 : |\psi_{n\ell}\rangle$ con $\begin{cases} \ell \in [0, n] \\ n \text{ pari} \Rightarrow \ell \text{ pari} \\ n \text{ dispari} \Rightarrow \ell \text{ dispari} \end{cases}$

ANISOTROPO:

$$\omega^2 = \omega_x^2 + \omega_y^2 + \omega_z^2 \Rightarrow E_n = \omega_x \hbar(n_1 + \frac{1}{2}) + \omega_2 \hbar(n_2 + \frac{1}{2}) + \omega_3 \hbar(n_3 + \frac{1}{2})$$

7 Algoritmi Risolutivi

AUTOVALORI E AUTOSTATI DI $\hat{F}$:

- Diagonalizzazione di matrice $\hat{F}$ (individuo autovalori)
- Individuazione degli autovettori (autostati) e normalizzazione (secondo prodotto scalare standard)
- Convien sempre spezzare $\hat{F} = f_0 \mathbb{I} + F_1$ e diagonalizzare $F_1 \Rightarrow$ autovalori = $f_0 + \lambda_{F_1}$

STATI POSSIBILI E RELATIVE PROBABILITÀ DA MISURA $\hat{F}$:

- Risultati possibili: autovalori di $\hat{F}$, $f_0 \dots f_N$ relativi a autostati $|1\rangle \dots |N\rangle$ (autovettori)
- Probabilità di ottenere f_J su misura di ψ che si trova nello stato $|i\rangle$: $\mathcal{P} = |c_J|^2 = \langle J|i\rangle^2$ (proiezione dello stato sul autospazio di $|J\rangle$)
- (altro modo) Se autovettori di $\hat{F}$ ortogonali: $|i\rangle = \sum_j c_j |J\rangle$ e risolvo per individuare $c_j \Rightarrow \mathcal{P} = |c_j|^2$

EVOLUZIONE TEMPORALE DI $F(\psi)$ NOTA MISURA DI F AL TEMPO $t = t_0$:

- $F_0 = f_i$ (autovalore di F) $\Rightarrow F(\psi(0)) = |i\rangle$
- scompongo in autovalori di H $|i\rangle = \sum_j c_j |E_j\rangle$
- Determino evoluzione temporale su ogni autostato dell'energia che compone $|i\rangle$: $\psi(t) = \sum_j e^{iE_j t/\hbar} c_j |E_j\rangle$

MISURE DI SPIN SU ASSI x E y :

- noto stato iniziale $|\psi\rangle$ si esegue misura s_i $|\psi\rangle = \psi'$
- esprimo $|\psi'\rangle$ in base di autostati di s_i : $|\psi'\rangle = a|+\rangle + b|-\rangle$
- $\mathcal{P}(s_i = \frac{1}{2}) = |a|^2$, $\mathcal{P}(s_i = -\frac{1}{2}) = |b|^2$

SVILUPPO IN ARMONICHE SFERICHE:

- Scrivo $|\psi(x, y, z)\rangle$ in sferiche: $x = r \sin(\theta) \cos(\varphi)$, $y = r \sin(\theta) \sin(\varphi)$, $z = r \cos(\theta)$
- raccolgo e separo la parte radiale $R(r)$
- sviluppo i termini in φ in esponenziali complessi mentre lascio quelli in θ in seni e coseni
- individuo armoniche sferiche relative, reintroduco $R(r)$ e normalizzo
- $|\psi\rangle$ è autostato di $\mathbf{L}^2$ se sviluppato in armoniche con unico numero quantico ℓ
- $|\psi\rangle$ è autostato di $\mathbf{L}_z$ se sviluppato in armoniche con unico numero quantico m

DECADIMENTI (INDIVIDUAZIONE STATO FINALE):

Noto stato iniziale $|J, J_z\rangle$, decadimento a due corpi A, B , con conservazione del momento angolare. Noto spin S totale, S_z e almeno parzialmente s_A, s_B .

- se non totalmente noti da $|s_A - s_B| \leq S \leq s_A + s_B$ ricavo i singoli spin (da qui supposti fissati univocamente, altrimenti discussione analoga)
- da $S_z = s_{zA} + s_{zB}$ ricavo combinazioni ammesse
- da $|\ell - S| \leq J \leq \ell + S$ ricavo condizioni su ℓ
- da $J_z = m_A + m_B$ ricavo combinazioni ammesse
- per ogni combinazione S, ℓ effettuo il cambio di base $|L, S, J, J_z\rangle \rightarrow |L, S, L_z, S_z\rangle$ utilizzando Clebsch-Gordan per determinare coefficienti di fronte a varie combinazioni in m, S_z
- $|\psi\rangle$ scrivibile in termini di armoniche sferiche e funzioni d'onda di spin
- se la combinazione S, S_z non è fissata univocamente e ve ne sono più ammesse utilizzo sempre Clebsch-Gordan per determinare coefficienti (e quindi probabilità): $|s_A, s_B, S, S_z\rangle \rightarrow |s_A, s_B, s_{zA}, s_{zB}\rangle$
- Matrice Densità: se non si ha determinazione univoca $|\psi\rangle = \sum_{j,\alpha} c_{j\alpha} |j\rangle \otimes |\alpha\rangle$ dove $|\alpha\rangle$ e $|j\rangle$ sono basi di elementi non fissati univocamente $\Rightarrow \rho_{jk} \equiv \sum_{\alpha} c_{j\alpha} c_{k\alpha}^*$

SPETTRO DI HAMILTONIANE NON NOTE:

- data H si cerca di scriverla come $H = H_0 + \Delta H$ dove H_0 è un hamiltoniana a spettro noto (oscillatore armonico, idrogeno...)
 - Nel caso dell'oscillatore armonico delle volte è necessario modificare ω^2 per aggiungere ΔH o perdere la simmetria sferica e ricondursi a oscillatori 2D o 1D $\Rightarrow$ anisotropia
 - Per ricondursi a H nota e dedurre quantità conservate utile:
$$\mathbf{J}_1 \cdot \mathbf{J}_2 = \frac{1}{2}((J_1 + J_2)^2 - \mathbf{J}_1^2 - \mathbf{J}_2^2), \quad (\mathbf{s}_1 \cdot \mathbf{r})(\mathbf{s}_2 \cdot \mathbf{r}) = \frac{1}{2}((\mathbf{S} \cdot \mathbf{r})^2 - (\mathbf{s}_1 \cdot \mathbf{r})^2 - (\mathbf{s}_2 \cdot \mathbf{r})^2) = \frac{1}{2}(\mathbf{S} \cdot \mathbf{r})^2 - \frac{1}{4}(\vec{\mathbb{I}} \cdot \mathbf{r})$$
- cerco base di autostati comuni per H_0 e ΔH tra quelli che so già diagonalizzare $H_0 \Rightarrow E_{\{n_i\}} = E_{0\{n_i\}} + \Delta E_{\{n_i\}}$ ($\{n_i\}$ rappresenta il set di numeri quantici scelto, $E_{0\{n_i\}}$ autostati di H_0)
- $\Delta E_{\{n_i\}}$ individuati cercando autovalori di ΔH separata
- Se non esiste base di autostati noti di H_0 comuni a ΔH scrivo elementi di matrice di H in una base che diagonalizza almeno H_0 , quindi diagonalizzo matrice trovata e trovo autovalori $\leftrightarrow$ autostati di E nella nuova base

SCELTA NUMERI QUANTICI E DEGENERAZIONE

- utilizzo operatori compatibili su tutta H
- faccio tutte combinazioni possibili per analizzare eventuali degenerazioni
- considero ovviamente anche numeri eventualmente non presenti esplicitamente in H (che creano molteplicità intrinseca)
- se H indipendente da spin, ma particella con spin $s \Rightarrow$ degenerazione $2s + 1 \forall$ autostato dell'energia
- se livello energetico si suddivide in sottolivelli (causa modifica di H) $\Rightarrow$ somma delle degenerazioni dei sottolivelli uguale alla degenerazione del livello energetico

QUANTITÀ CONSERVATE:

- Momento Angolare: $H = H(\mathbf{J})$, $\begin{cases} [J_z, H] = 0 \Rightarrow [J^2, H] = 0 \\ [J^2, H] = 0 \Rightarrow [J_i, H] = 0 \forall i \end{cases}$
- Momento Angolare: $H = H(J_i) \Rightarrow [J_i, H] = 0$, ma di norma le altre componenti non si conservano
- Momento Angolare: $H = H(\mathbf{A} \cdot \mathbf{B})$ con $A = A(\mathbf{x}, \mathbf{p}, \mathbf{s})$, $B = B(\mathbf{x}, \mathbf{p}, \mathbf{s})$ cioè, essendo l'energia dipendente solo da quantità scalari, il sistema è invariante per rotazioni $\Rightarrow [\mathbf{J}, H] = 0$

EVOLUZIONE TEMPORALE NOTO SPETTRO:

Si vuole studiare evoluzione temporale nota H e suo spettro in L, S e lo stato iniziale in $|J, J_z\rangle$

- Scrivo ψ in termini di armoniche sferiche e funzioni di spin: $\psi = \sum_i c_i Y_{(\ell, m)_i} |s_i\rangle$
- ricavo c_i con Clebsch-Gordan nel cambio: $|L, s, J, J_z\rangle \rightarrow L, s, L_z, s_z$
- $\psi(t) = e^{-iHt/\hbar} \psi(0)$ dove è nota azione su ogni autostato: $e^{-iHt/\hbar} c Y_{\ell, m} |s\rangle = e^{-ik_{\ell, m, s} t/\hbar} c Y_{\ell, m} |s\rangle$
- Eseguo cambio di base inverso per tornare allo stato in $|J, J_z\rangle$: sviluppo di Clebsch-Gordan da eseguire per ogni autostato di L, S
- Ovviamente gli stati sono quelli iniziali ma l'azione di H sarà differenziata all'interno di dei coefficienti
- Probabilità di ottenere all'istante t vari valori ottenute quadrando tali coefficienti (ovviamente contenenti $e^{-ik_{\ell, m, s} t/\hbar}$)