

Capitolo W77

promtuario: meccanica quantistica

Contenuti delle sezioni

- a. valori di aspettazione in una dimensione p. 2
- b. coordinate sferiche p. 3
- c. oscillatore armonico p. 4
- d. valori di aspettazione in tre dimensioni p. 5
- e. atomo idrogenoide p. 6
- f. momenti angolari ed effetti magnetici p. 7
- g. integrali notevoli per la quantistica p. 9
- h. numeri quantici e codifiche convenzionali p. 10
- i. effetti magnetici p. 11

11 pagine

W77 0.01 Gran parte delle definizioni e dei risultati della meccanica quantistica sono esprimibili mediante formule che spesso risultano alquanto elaborate.

Fine di questo capitolo è una presentazione di definizioni e risultati della meccanica quantistica che possa costituire un conveniente riferimento compatto per lo studio e le applicazioni della disciplina.

Le formule che seguono si possono distinguere in due categorie.

Quelle della prima categoria riguardano sistemi quantici specifici e strutture generali per la disciplina. Quelle della seconda classe, inserite per rendere il capitolo un repertorio più autonomo e completo, toccano varie nozioni matematiche (dell'analisi, della geometria e della fisica matematica) che possono essere viste come preliminari delle formule più strettamente quantistiche.

W77 a. valori di aspettazione in una dimensione

W77 a.01 Funzione d'onda $\Psi(x, t)$ grandezze $f(x, t)$ e $F(x, p, t)$

$$\langle f(x, t) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x, t) f(x, t) \cdot \Psi(x, t) \quad \langle F(x, p, t) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x, t) F_{op} \left(x, -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, t \right) \cdot \Psi(x, t)$$

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x, t) x \cdot \Psi(x, t) \quad \langle p \rangle = -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x, t) \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x, t)$$

$$\langle E \rangle = i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x, t) \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) \quad \Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} \quad \Delta p = \sqrt{\langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2}$$

potenziale pari $\implies \langle x \rangle = \langle p \rangle = 0, \Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle}, \Delta p = \sqrt{\langle p^2 \rangle}$

W77 b. coordinate sferiche

W77 b.01

$$\begin{aligned}
 r &= \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} & 0 \leq r < \infty & & x &= r \cos \phi \sin \theta \\
 \theta &= \arccos z/r & 0 \leq \theta < \pi & & y &= r \sin \phi \sin \theta \\
 \phi &= \arctan y/x & 0 \leq \phi < 2\pi & & z &= r \cos \theta
 \end{aligned}$$

$$\frac{\partial}{\partial x} = \cos \phi \sin \theta \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \cos \phi \cos \theta \frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{1}{r} \frac{\sin \phi}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi}$$

$$\frac{\partial}{\partial y} = \sin \phi \sin \theta \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \cos \phi \cos \theta \frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{1}{r} \frac{\sin \phi}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi}$$

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2}$$

$$\mathbf{p} \cdot \mathbf{p} = -\hbar^2 \nabla^2$$

W77 c. oscillatore armonico

W77 c.01 Potenziale $V(x) = \frac{1}{2} K x^2$ con $K > 0$

$$\nu_c = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{K}{m}} \quad \alpha = \left(\frac{mK}{\hbar^2}\right)^{1/4} \quad E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \nu_c$$

$$n = 0, 1, 2, \dots \quad \psi_n(x) = N_n \text{Hrmt}_n(\alpha x) e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 x^2} \quad \xi := \alpha x \quad N_n = \sqrt{\frac{\alpha}{\pi^{1/2} 2^n n!}}$$

$\text{Hrmt}_n(\xi) = (-)^n e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2}$ polinomio di Hermite di grado n

$$\text{Hrmt}_0(\xi) = 1, \text{Hrmt}_1(\xi) = 2\xi, \text{Hrmt}_2(\xi) = 4\xi^2 - 2, \text{Hrmt}_{n+1}(\xi) = 2\xi \text{Hrmt}_n(\xi) - 2n \text{Hrmt}_{n-1}(\xi)$$

$$\psi_0 = N_0 e^{-\xi^2/2}, \quad \psi_1 = N_1 \xi e^{-\xi^2/2}, \quad \psi_2 = N_2 (1 - 2\xi^2) e^{-\xi^2/2},$$

$$\psi_3 = N_3 (3\xi - 2\xi^3) e^{-\xi^2/2}, \quad \psi_4 = N_4 (3 - 12\xi^2 + 4\xi^4) e^{-\xi^2/2}$$

W77 d. valori di aspettazione in tre dimensioni

W77 d.01 Funzione d'onda $\psi(r, \theta, \phi)$ grandezza $f(r, \theta, \phi)$

$$\langle f(r, \theta, \phi) \rangle = \int_0^{+\infty} dr r^2 \int_0^\pi d\theta \sin \theta \int_0^{2\pi} d\phi \psi^*(r, \theta, \phi) f(r, \theta, \phi) \psi(r, \theta, \phi)$$

Simmetria sferica, cioè $\psi = \psi(r)$

$$\langle x \rangle = \langle y \rangle = \langle z \rangle = \langle p_x \rangle = \langle p_y \rangle = \langle p_z \rangle = 0$$

$$\langle x^2 \rangle = \langle y^2 \rangle = \langle z^2 \rangle = \frac{1}{3} \langle r^2 \rangle$$

$$\langle p_x^2 \rangle = \langle p_y^2 \rangle = \langle p_z^2 \rangle = \frac{1}{3} \langle p^2 \rangle = -\frac{\hbar^2}{3} \langle \nabla^2 \rangle$$

$$\langle f(r) \rangle = \int_0^\pi d\theta \sin \theta \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{+\infty} dr r^2 \psi^* f(r) \psi(r) = 4\pi \int_0^{+\infty} dr r^2 f(r) |\psi(r)|^2$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{3} \langle p^2 \rangle &= -\frac{\hbar^2}{3} \int_0^\pi d\theta \sin \theta \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{+\infty} dr r^2 \psi^* \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left[r^2 \frac{\partial}{\partial r} \psi(r) \right] \\ &= 4\pi \int_0^{+\infty} dr r^2 \psi^* \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left[r^2 \frac{\partial}{\partial r} \psi(r) \right] \end{aligned}$$

W77 e. atomo idrogenoide

W77 e.01 $\psi_{n,l,m}(r, \theta, \phi) = R_{n,l} Y_{sph_{l,m}}(\theta, \phi) =$

$$= -\sqrt{\left(\frac{2Z}{na_0}\right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3}} e^{-\rho/2} \rho^l \mathbf{Plgdra}_{n+l}^{2l+1}(\rho) Y_{sph_{l,m}}(\theta, \phi)$$

$n = 1, 2, 3, \dots \quad l = 0, 1, 2, \dots, n-1 \quad m = -l, -l+1, \dots, 0, \dots, l-1, l$

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{e M_e} \quad \rho = \frac{2Zr}{na_0} \quad , \quad E_n = -\frac{Z^2 e^4 m_e}{2\hbar^2 n^2} = -\frac{Z^2 \mathbf{h} e}{n^2} \quad , \quad R = \frac{m_e e^4}{4\pi\hbar^3 c} = \frac{2\pi^2 m_e e^4}{\mathbf{h}^3 c}$$

$$Llag_{\beta}^{\alpha}(\rho) = \frac{d^{\alpha}}{d\rho^{\alpha}} \left[e^{\rho} \frac{d^{\beta}}{d\rho^{\beta}} (\rho^{\beta} e^{-\rho}) \right] \quad \text{polinomio di Laguerre}$$

$\beta = 0, 1, 2, \dots \quad \alpha = 0, 1, 2, \dots, n$

$$Y_{sph_{l,m}}(\theta, \phi) = (-1)^{\frac{|m|-m}{2}} \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}} \mathbf{Plgdra}_l^{|m|}(\cos \theta) e^{im\phi} \quad \text{funzione sferica di superficie}$$

$$\mathbf{Plgdra}_l^{|m|}(\xi) = (-1)^m (1-\xi^2)^{\frac{|m|}{2}} \frac{d^{|m|} \mathbf{Plgdr}_l(\xi)}{d\xi^{|m|}} \quad \text{funzioni associate di Legendre}$$

$$\mathbf{Plgdr}_l(\xi) = (-1)^l \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{d\xi^l} (1-\xi^2)^l \quad \text{polinomio di Legendre di grado } l$$

Strato K stato 1s $\psi_{100} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} e^{-\rho/2}$

Strato L stati:

$$2s \quad \psi_{200} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} (2-\rho) e^{-\rho/2}$$

$$2p \quad \psi_{210} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \rho e^{-\rho/2} \cos \theta$$

$$2p \quad \psi_{21\pm 1} = \mp \frac{1}{8\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \rho e^{-\rho/2} \sin \theta e^{\pm i\phi}$$

W77 f. momenti angolari ed effetti magnetici

W77 f.01 momento angolare orbitale $\vec{L} := \vec{r} \times \vec{p}$ $L_z = x p_y - y p_x, \dots$

$$L^2_{(op)} = -\hbar^2 \nabla_a^2 = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right] \quad L_{z(op)} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi}$$

autofunzioni degli atomi idrogenoidi senza spin $\psi_{nlm}(r, \theta, \phi)$

$$L^2 \psi_{nlm} = l(l+1) \hbar^2 \psi_{nlm} \quad l = 0, 1, \dots, n-1$$

$$L_z \psi_{nlm} = m \hbar \psi_{nlm} \quad m = -l, -l+1, \dots, 0, \dots, l-1, l$$

orbitali corrispondenti: $l = 0 \Rightarrow s$ $l = 1 \Rightarrow p$ $l = 2 \Rightarrow d$ $l = 3 \Rightarrow f$

$l = 0 \iff \psi_{n00}(r, \theta, \phi) = \psi_{n00}(r) \iff$ simmetria sferica

$$\implies \langle x \rangle = \langle y \rangle = \langle z \rangle = \langle \vec{r} \rangle = \langle p_x \rangle = \langle p_y \rangle = \langle p_z \rangle = \langle \vec{p} \rangle = 0$$

$$\langle x^2 \rangle = \langle y^2 \rangle = \langle z^2 \rangle = 1/3 \langle r^2 \rangle \quad \langle p_x^2 \rangle = \langle p_y^2 \rangle = \langle p_z^2 \rangle = 1/3 \langle p^2 \rangle = -\frac{\hbar^2}{3} \langle \nabla^2 \rangle$$

$$\langle f(r) \rangle = 4\pi \int_0^{+\infty} dr r^2 \psi^*(r) f(r) \psi(r) \quad \langle \nabla^2 \rangle = 4\pi \int_0^{+\infty} dr \psi^* \frac{\partial}{\partial r} \left[r^2 \frac{\partial}{\partial r} \psi(r) \right]$$

momento di dipolo magnetico orbitale $\vec{\mu}_l = -\frac{g_l \mu_b}{\hbar} \vec{L}$

$$\mu_b = \frac{e\hbar}{2m_e} = 0.927 \cdot 10^{-23} \text{Am}^2 \quad \text{magnetone di Bohr}; \quad g_l = 1 \quad \text{fattore orbitale}$$

energia di interazione dipolo - campo magnetico $-\vec{\mu}_l \cdot \vec{B}$

momento angolare intrinseco o spin \vec{S}

autofunzioni di L^2, L_z, S^2, S_z : ψ_{nlmsm_s}

$$S^2 \psi = s(s+1) \hbar^2 \psi \quad \text{per l'elettrone } s = \frac{1}{2}$$

$$S_z \psi = m_s \hbar \psi \quad \text{per l'elettrone } m_s = \pm \frac{1}{2}$$

momento di dipolo magnetico di spin - campo magnetico $\vec{\mu}_s = -\frac{g_s \mu_b}{\hbar} \vec{S}, g_s = 2$

energia di interazione spin - campo magnetico $\pm g_s \mu_b \frac{B}{2}$

deviazione Δz di Stern-Gerlach di atomo di massa M e velocità v_x per il quale $\frac{1}{2} M v_x^2 = 2 K_B T$ che attraversa magnete di lunghezza X e gradiente $\frac{\partial B_z}{\partial z}$:

$$\Delta z = \pm \frac{\partial B_z}{\partial z} \frac{\mu_b X^2}{8 K_B T}$$

momento angolare totale $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$ autofunzioni $\psi_{nl_s j m_j}$

$$J^2 \psi = j(j+1) \hbar^2 \psi \quad \text{per l'elettrone } j = l - \frac{1}{2}, l + \frac{1}{2} \text{ (valori semidispari)}$$

$$J_z \psi = m_j \hbar \psi \quad m_j = -j, -j+1, \dots, j-1, j$$

$$(\vec{S} \cdot \vec{L}) \psi = \frac{\hbar^2}{2} [j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)] \psi$$

energia di interazione spin - orbita $l \geq 1$ $E_{SL} = \frac{1}{2m_e^2 c^2} \frac{1}{r} \frac{dV(r)}{dr} (\vec{S} \cdot \vec{L})$

per atomi idrogenoidi: $s = \frac{1}{2}, V = -\frac{e^2 Z}{4\pi \epsilon_0 r}, E_{SL} = \frac{e^2 Z}{4\pi \epsilon_0 2m_e^2 c^2} \frac{1}{r^3} (\vec{S} \cdot \vec{L})$

$$\langle E_{SL} \rangle_{j,l,s} = \frac{\hbar^2}{4m_e^2 c^2} [j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)] \left\langle \frac{1}{r} \frac{dV(r)}{dr} \right\rangle$$

$$\langle E_{SL} \rangle_{j,l} = \frac{e^2 Z}{4\pi \epsilon_0 2m_e^2 c^2} [j(j+1) - l(l+1) - 3/4] \left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle$$

$$= \frac{|E_n| \alpha^2 Z^4}{n l (l + \frac{1}{2}) (l + 1)} \frac{1}{2} [j(j + 1) - l(l + 1) - 3/4] \left(|E_n| = \frac{13.607 \text{ eV}}{n^2}, \alpha = \frac{e^2}{4\epsilon_0 \hbar c} \simeq \frac{1}{137} \right)$$

W77 g. integrali notevoli per la quantistica

$$\mathbf{W77\ g.01} \quad \int_0^{+\infty} dx \, x^n e^{-x} = n!$$

$$I_m := \int_{-\infty}^{+\infty} dx \, x^m e^{-x^2} = \frac{m-1}{2} I_{m-2}$$

$$I_0 = \sqrt{\pi} \quad , \quad I_1 = \sqrt{\pi} \quad , \quad I_2 = \sqrt{\frac{\pi}{2}} \quad , \quad I_4 = \sqrt{\frac{\pi}{2}} \quad , \quad I_{2n} = \frac{(2n-1)!!}{2^n} \sqrt{\pi}$$

$$\int_0^{\pi} dx \, \cos^2 x = \int_0^{\pi} dx \, \sin^2 x = \frac{\pi}{2} \quad , \quad \int_0^{\pi} dx \, \cos^2 x \sin^2 x = \frac{\pi}{8}$$

$$\int_0^{\pi/2} dx \, \sin^n x \cos x = \int_0^{\pi/2} dx \, \sin x \cos^n x = \frac{1}{n+1}$$

$$\int_0^{\pi/2} dx \, \sin^n x \cos^k x = \frac{n!k!}{2(n+k+1)!}$$

W77 h. numeri quantici e codifiche convenzionali

W77 h.01 $n = 1, 2, 3, \dots$ $l = 0, 1, \dots, n - 1$

orbitali corrispondenti: $l = 0 \Rightarrow s$, $l = 1 \Rightarrow p$, $l = 2 \Rightarrow d$, $l = 3 \Rightarrow f$

$m = -l, -l+1, \dots, 0, \dots, l-1, l$ $m_s = -s, \dots, s$ $j = l-s, \dots, l+s$ $m_j = -j, -j+1, \dots, j-1, j$

per atomi idrogenoidi, alcalini e simili $s = \frac{1}{2}$, $m_s = \pm \frac{1}{2}$, $j = l - \frac{1}{2}, l + \frac{1}{2}$

W77 i. effetti magnetici

W77 i.01 energia di interazione spin - campo magnetico $\pm g_s \mu_b \frac{B}{2}$

ove $g_s = 2$, $\mu_b = \frac{e \hbar}{2 m_e} = 0.927 \cdot 10^{-23} \text{J/T}$ ($= \text{A m}^2$) magnetone di Bohr

$\Rightarrow B$ efficace che porta a spaz. spin-orbita $2 \mu_b B = \langle \Delta E_{SL} \rangle = \hbar c \left(\frac{1}{l} - \frac{1}{l'} \right)$

deviazione Δz di Stern-Gerlach di atomo di massa M e vel. v_x $\left(\frac{1}{2} M v_x^2 = 2 K_B T \right)$

che attraversa magnete di lunghezza X e gradiente $\frac{\partial B_z}{\partial z}$: $\Delta z = \pm \frac{\frac{\partial B_z}{\partial z} \mu_b X^2}{8 K_B T}$

energia di interazione spin-orbita $l \geq 1$ $E_{SL} = \frac{1}{2 m_e^2 c^2} \frac{1}{r} \frac{dV(r)}{dr} (\vec{S} \cdot \vec{L})$

per atomi idrogenoidi $s = \frac{1}{2}$, $V = -\frac{e^2 Z}{4 \pi \epsilon_0} \left\langle \frac{1}{r} \right\rangle$, $E_{SL} = \frac{e^2 Z}{4 \pi \epsilon_0 2 m_e^2 c^2} \frac{1}{r^3} (\vec{S} \cdot \vec{L})$

$\langle E_{SL} \rangle_{j,l,s} = \frac{\hbar^2}{4 m_e^2 c^2} [j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)] \left\langle \frac{1}{r} \frac{dV(r)}{dr} \right\rangle$

per atomi idrogenoidi $\langle E_{SL} \rangle_{j,l} = \frac{e^2 Z}{4 \pi \epsilon_0 2 m_e^2 c^2} [j(j+1) - l(l+1) - 3/4] \left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle =$

$$\frac{|E_n| \alpha^2 Z^4}{n l (l + \frac{1}{2}) (l + 1)} \frac{1}{2} [j(j+1) - l(l+1) - 3/4] \left(|E_n| = \frac{13.607 \text{ eV}}{n^2}, \alpha = \frac{e^2}{4 \epsilon_0 \hbar c} \simeq \frac{1}{137} \right)$$

spaziatura dei livelli dovuta a interazione spin-orbita $\langle \Delta E_{SL} \rangle = \langle \Delta E_{SL} \rangle_{j_1} - \langle \Delta E_{SL} \rangle_{j_2}$

risoluzione necessaria per osservare separazione SL

$$\frac{\delta \lambda}{\lambda} = \frac{\langle \Delta E_{SL} \rangle}{E_{\rightarrow n}} \left(E_{\rightarrow n} = 13.607 \text{ eV} \left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{n^2} \right) \right)$$

Testo fruibile in <https://www.mi.imati.cnr.it/alberto/> e https://arm.mi.imati.cnr.it/Matexp/matexp_main.php