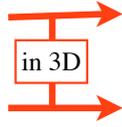


Operatori: richiami

Operatore posizione \hat{x} : x



\mathbf{r}

Operatore momento \hat{p} : $\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$

$\frac{\hbar}{i} \nabla$

Detti \hat{Q}, \hat{W} due operatori, la grandezza $[\hat{Q}, \hat{W}] = \hat{Q}\hat{W} - \hat{W}\hat{Q}$ è detta *commutatore* di \hat{Q} e \hat{W} e rappresenta l'operazione:

$$[\hat{Q}, \hat{W}] \Psi = \hat{Q}(\hat{W}\Psi) - \hat{W}(\hat{Q}\Psi)$$

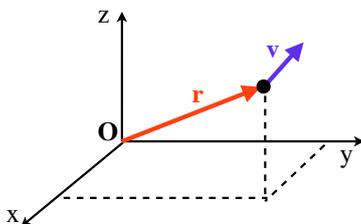
Si dimostra che operatori con stessi autostati

1] **commutano;**

2] **corrispondono a grandezze simultaneamente misurabili.**

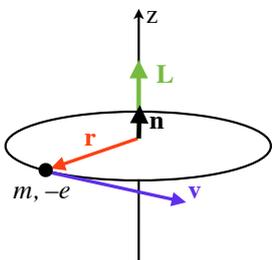
Momento angolare.

Momento angolare classico.



Momento angolare
(momento della quantità di moto):

$$\mathbf{L} = \mathbf{r} \times m\mathbf{v} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$$



Elettrone su un'orbita circolare:

$$\mathbf{L} = \mathbf{r} \times m\mathbf{v} = mvr\mathbf{n}$$

Momento angolare quantistico.

Momento angolare classico:

$$\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$$

ovvero:

$$L_x = yp_z - zp_y$$

$$L_y = zp_x - xp_z$$

$$L_z = xp_y - yp_x$$

Principio di
corrispondenza:

Espressione operatoriale:

$$\hat{\mathbf{L}} = \mathbf{r} \times \frac{\hbar}{i} \nabla$$

$$L_x = y \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y}$$

$$L_y = z \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z}$$

$$L_z = x \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$$

Momento angolare quantistico: la misura.

Espressione operatoriale: $\hat{\mathbf{L}} = \mathbf{r} \times \frac{\hbar}{i} \nabla$

$$L_x = y \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y}$$

$$L_y = z \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z}$$

$$L_z = x \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$$

Richiamo: operatori con stessi autostati

1] commutano;

2] corrispondono a grandezze simultaneamente misurabili.

Le componenti del momento angolare **non commutano**.

$$[L_x, L_y] = i\hbar L_z$$

Si ottiene facilmente (con molta algebra):

$$[L_z, L_x] = i\hbar L_y$$

$$[L_y, L_z] = i\hbar L_x$$

Non è possibile misurare simultaneamente due componenti di \mathbf{L} .

Il quadrato del momento angolare totale e una qualunque componente di \mathbf{L} **commutano**:

$$[L^2, L_{x,y,z}] = 0$$

È possibile misurare simultaneamente L^2 e una componente di \mathbf{L} .

Momento angolare: autofunzioni e autovalori

È possibile misurare simultaneamente L^2 e una componente di \mathbf{L} .

Cerco funzioni ψ t.c.

$$L^2 \psi = \omega_l \hbar^2 \psi$$

$$L_z \psi = m \hbar \psi$$

\hbar tiene conto
delle dimensioni

con $\hat{\mathbf{L}} = \mathbf{r} \times \frac{\hbar}{i} \nabla$

In coordinate sferiche: $\nabla = \hat{\mathbf{r}} \frac{\partial}{\partial r} + \hat{\boldsymbol{\theta}} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \hat{\boldsymbol{\phi}} \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi}$

sviluppando: $\hat{\mathbf{L}} = \frac{\hbar}{i} \left(\hat{\boldsymbol{\phi}} \frac{\partial}{\partial \theta} - \hat{\boldsymbol{\theta}} \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \right)$

$$L_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \phi}$$

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

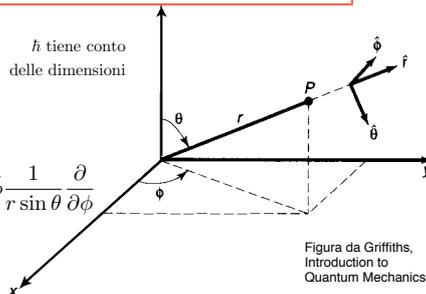


Figura da Griffiths,
Introduction to
Quantum Mechanics

Momento angolare: autovalori.

È possibile misurare simultaneamente L^2 e una componente di L .

Le autofunzioni simultanee di L^2 e L_z sono le *armoniche sferiche*: $Y_l^m(\theta, \phi)$

Le equazioni agli autovalori forniscono autovalori quantizzati:

$$L^2\psi = l(l+1)\hbar^2\psi \quad \begin{array}{l} l \text{ è intero per le armoniche sferiche;} \\ \text{sono ammessi formalmente anche valori semiinteri} \end{array}$$

$$L_z\psi = m\hbar\psi \quad -l \leq m \leq l$$

notare: la "lunghezza" di L , $\sqrt{l(l+1)}\hbar$, è sempre *maggiore* della grandezza di L_z , $m\hbar$, a indicare che la conoscenza di una componente **non** determina L .

Momento angolare: autofunzioni.

Le autofunzioni del momento angolare hanno l intero e $-l \leq m \leq l$

Table 4.2: The first few spherical harmonics, $Y_l^m(\theta, \phi)$.

$Y_0^0 = \left(\frac{1}{4\pi}\right)^{1/2}$	$Y_2^{\pm 2} = \left(\frac{15}{32\pi}\right)^{1/2} \sin^2\theta e^{\pm 2i\phi}$
$Y_1^0 = \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/2} \cos\theta$	$Y_3^0 = \left(\frac{7}{16\pi}\right)^{1/2} (5\cos^3\theta - 3\cos\theta)$
$Y_1^{\pm 1} = \mp \left(\frac{3}{8\pi}\right)^{1/2} \sin\theta e^{\pm i\phi}$	$Y_3^{\pm 1} = \mp \left(\frac{21}{64\pi}\right)^{1/2} \sin\theta(5\cos^2\theta - 1)e^{\pm i\phi}$
$Y_2^0 = \left(\frac{5}{16\pi}\right)^{1/2} (3\cos^2\theta - 1)$	$Y_3^{\pm 2} = \left(\frac{105}{32\pi}\right)^{1/2} \sin^2\theta \cos\theta e^{\pm 2i\phi}$
$Y_2^{\pm 1} = \mp \left(\frac{15}{8\pi}\right)^{1/2} \sin\theta \cos\theta e^{\pm i\phi}$	$Y_3^{\pm 3} = \mp \left(\frac{35}{64\pi}\right)^{1/2} \sin^3\theta e^{\pm 3i\phi}$

Tabella da Griffiths, Introduction to Quantum Mechanics

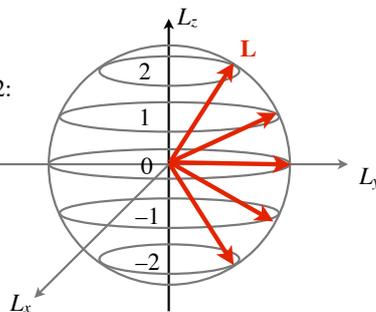
Rappresentazioni delle armoniche sferiche su:

[http://www.quantum-physics.polytechnique.fr/Sez. 5.1](http://www.quantum-physics.polytechnique.fr/Sez.5.1) (armoniche sferiche)

Momento angolare: autostati, autovalori.

Una possibile rappresentazione per $l = 2$:

Attenzione: l'analogia non va spinta oltre. In particolare il disegno dei vettori è fuorviante: se uno stato ha L_z determinato, allora L_x e L_y sono indeterminati perché non hanno autostati comuni con L_z .



Le equazioni agli autovalori forniscono autovalori quantizzati:

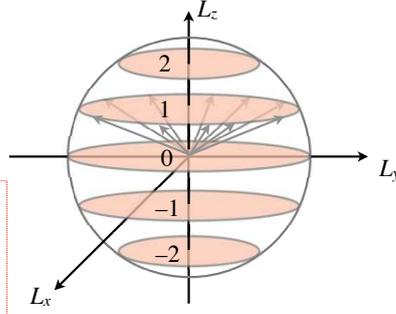
$$L^2\psi = l(l+1)\hbar^2\psi \quad l \text{ intero o semiintero, intero per le armoniche sferiche}$$

$$L_z\psi = m\hbar\psi \quad -l \leq m \leq l$$

notare: la "lunghezza" di L , $\sqrt{l(l+1)}\hbar$, è sempre *maggiore* della grandezza di L_z , $m\hbar$, a indicare che la conoscenza di una componente **non** determina L .

Momento angolare: autostati, autovalori.

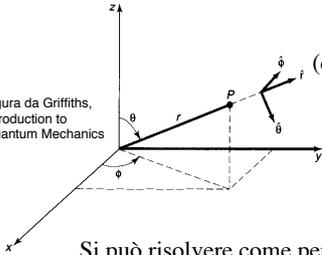
Una possibile rappresentazione alternativa per $l = 2$:



Attenzione: l'analogia non va spinta oltre. In particolare il disegno dei vettori "rotanti" è fuorviante: se uno stato ha L_z determinato, allora L_x e L_y sono indeterminati perché non hanno autostati comuni con L_z . Una misura di L_z proietta il sistema in uno stato per cui L_x e L_y sono indeterminati.

Potenziale centrale: fdo

Figura da Griffiths, Introduction to Quantum Mechanics



Sia $V=V(r)$ un potenziale a simmetria sferica (dipendente solo dalla distanza da un punto -origine-). L'equazione di Schroedinger si può scrivere in coordinate polari:

$$\frac{1}{2mr^2} \left[-\hbar^2 \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial^2}{\partial r} \right) + L^2 \right] \psi + V(r)\psi = E\psi$$

Si può risolvere come per il momento angolare per separazione di variabili.

Gli stati stazionari (autofunzioni dell'Hamiltoniana) sono:

$$\psi(r, \theta, \phi) = R(r)Y_l^m(\theta, \phi)$$

dove le $R(r)$ sono funzioni della sola r , e le $Y_l^m(\theta, \phi)$ sono le armoniche sferiche.

$\hat{H}, \mathbf{L}^2, L_z$ sono simultaneamente misurabili.

$V(r)$ influenza esclusivamente la dipendenza radiale $R(r)$.

Momento angolare: riassunto

Le componenti del momento angolare **non commutano**.

$$\begin{aligned} [L_x, L_y] &= i\hbar L_z \\ [L_z, L_x] &= i\hbar L_y \\ [L_y, L_z] &= i\hbar L_x \end{aligned}$$

Non è possibile misurare simultaneamente due componenti di \mathbf{L} .

Il quadrato del momento angolare totale e una qualunque componente di \mathbf{L} **commutano**:

$$[L^2, L_{x,y,z}] = 0$$

È possibile misurare simultaneamente L^2 e una componente di \mathbf{L} .

Le autofunzioni simultanee di L^2 e L_z sono le *armoniche sferiche*: $Y_l^m(\theta, \phi)$

Con autovalori dati da:

$$\begin{aligned} L^2\psi &= l(l+1)\hbar^2\psi & l &= 0, 1, 2, \dots \\ L_z\psi &= m\hbar\psi & -l &\leq m \leq l \end{aligned}$$

Potenziale centrale $V(r)$: gli stati stazionari (autofunzioni dell'Hamiltoniana) sono:

$$\psi(r, \theta, \phi) = R(r)Y_l^m(\theta, \phi)$$

dove le $R(r)$ sono funzioni della sola r , determinate da $V(r)$

$\hat{H}, \mathbf{L}^2, L_z$ sono simultaneamente misurabili in un potenziale centrale.

Analisi quantitativa

È possibile misurare sia L_{rot} (per esempio, attraverso il periodo delle piccole oscillazioni) che il momento magnetico complessivo della sbarra, M .

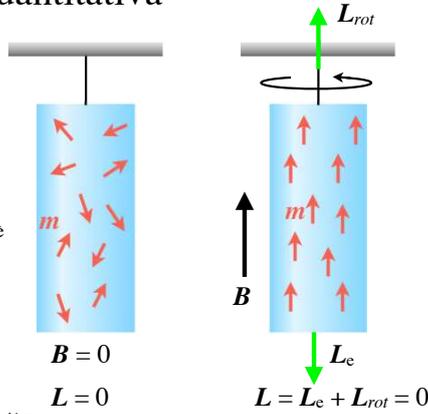
Supponiamo che vi siano N elettroni, ciascuno con momento angolare microscopico \mathbf{j} e quindi momento magnetico orbitale $\mathbf{m} = \frac{(-e)\hbar}{2m}\mathbf{j}$

La somma di tutti i momenti angolari microscopici è $\mathbf{L}_e = N\mathbf{j}$

Il momento magnetico della sbarra è $\mathbf{M} = N\mathbf{m}$

La conservazione del momento angolare impone $\mathbf{L}_{rot} = -N\mathbf{j}$

Per cui: $\mathbf{M} = N\frac{(-e)\hbar}{2m}\mathbf{j} = \frac{(-e)\hbar}{2m}\mathbf{L}_{rot} = -\frac{\mu_B}{\hbar}\mathbf{L}_{rot}$



Sperimentalmente:

Il momento magnetico è **maggiore** del solo momento orbitale. Il rapporto giromagnetico vale ≈ -2 .

$\mathbf{M} \approx -2 \frac{\mu_B}{\hbar} \mathbf{L}_{rot}$ Esiste un **ulteriore e diverso** momento magnetico microscopico

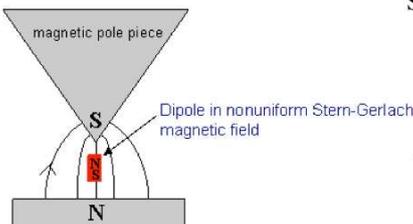
Esperimento di Stern-Gerlach

Esperimento di Stern-Gerlach

$$L^2\psi = l(l+1)\hbar^2\psi \quad l=0,1,2,\dots$$

$$L_z\psi = m\hbar\psi \quad m=0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$$

Per osservare l'effetto della quantizzazione sull'asse z , si sfrutta l'esistenza di un momento magnetico associato al momento angolare.



Si invia un fascio di particelle massive (es: atomi di Ag), in un campo magnetico disomogeneo lungo l'asse z : i poli S e N del momento magnetico subiranno forze disuguali, e a seconda dell'orientazione del momento magnetico saranno deflessi lungo z sotto l'azione della forza:

$$\mathbf{F} = -\nabla V = \nabla(\mathbf{m} \cdot \mathbf{B}) \approx m_z \nabla B_z$$

(trascuriamo le variazioni lungo x e y)

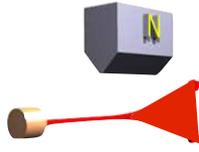
Se le particelle non hanno momento angolare, l'analisi dei risultati riguarda solo i momenti angolari degli elettroni.

Esperimento di Stern-Gerlach

Risultati attesi:

Classicamente:

con un fascio in cui i momenti angolari sono distribuiti a caso, si ha un allargamento del fascio.



Quantisticamente,

momento magnetico proporzionale al momento orbitale:

un numero dispari di deflessioni,

perché

$$L_z \psi = m \hbar \psi \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$$

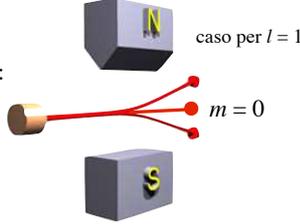


figure adattate da D.M.Harrison,

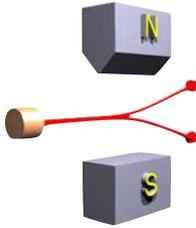
<http://www.upscale.utoronto.ca/GeneralInterest/Harrison/SternGerlach/SternGerlach.html>

Esperimento di Stern-Gerlach

Risultato sperimentale:

DUE fascetti separati.

Esperimento ripetuto anche con atomi in cui $l = 0$.



Se ne deduce che il momento magnetico lungo una determinata direzione è quantizzato e può assumere solo **due valori opposti**.

Si inferisce che il momento magnetico stesso sia quantizzato.

Poiché a un momento magnetico corrisponde un momento angolare (vedi esperimento di Einstein-de Haas), questo esperimento implica che gli elettroni abbiano un momento angolare **intrinseco (spin)**.

figura da D.M.Harrison, <http://www.upscale.utoronto.ca/GeneralInterest/Harrison/SternGerlach/SternGerlach.html>

Spin

La combinazione di due esperimenti fondamentali (Stern-Gerlach e Einstein-de Haas) indica che i momenti magnetici di spin sono legati a un **ulteriore e diverso** momento angolare, intrinseco agli elettroni (e ad altre particelle, in generale).

Esso prende il nome di **“spin” S**

È un momento angolare (quindi ne segue le regole), MA NON È dovuto a rotazioni meccaniche: è una proprietà intrinseca della particella (come ad es. massa o la carica).

Per i momenti orbitali:

$$\mathbf{m} = -\frac{e}{2m} \mathbf{L} = -\frac{\mu_B}{\hbar} \mathbf{L}$$

analogamente per i momenti angolari di spin:

$$\mathbf{m}_s = -\frac{e}{m} \mathbf{S} = -2\frac{\mu_B}{\hbar} \mathbf{S}$$

S è quantizzato, e la sua proiezione sull'asse z è $S_z = \pm \hbar/2$,

ovvero il numero quantico corrispondente può assumere valori $m_s = \pm 1/2$.

In analogia (si può dimostrare) al momento angolare,

S² ha autovalori discreti dati da:

$$s(s + 1)\hbar^2$$

dove **per gli elettroni, legati o liberi, $s = 1/2$** .

Spin.

Oltre al momento angolare orbitale, esiste il momento angolare di spin (o "spin").

Lo spin è una grandezza intrinseca, non è dovuta a rotazioni meccaniche.

Lo spin è una proprietà quantistica, non ha analogo classico.

Allo spin è associato un momento magnetico.

È descrivibile come fdo (esperienza dei filtri di Stern Gerlach).

Le proprietà di osservabilità sono come quelle dei momenti angolari:

S^2 ha autovalori $s(s+1)$.

La proiezione su un asse, S_z , ha autovalori: $m = -s, -s+1, \dots, s-1, s$

L'autovalore dello spin di una particella assume valori: $S = 0, 1/2, 1, 3/2, \dots$

L'autovalore dello spin di un singolo gli elettrone, legato o libero, vale $s = 1/2$

Nota sulla combinazione dei momenti angolari orbitali e di spin.

Un sistema (ad esempio, un atomo) può contenere numerosi elettroni.

Il momento angolare totale \mathbf{J} rappresenta la somma di tutti i momenti angolari dei singoli elettroni (orbitali e di spin): $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$.

Il momento magnetico totale, similmente, sarà dato da $\mathbf{m}_J = \mathbf{m}_L + \mathbf{m}_S$.

Mentre $\mathbf{m}_L \parallel \mathbf{L}$, e $\mathbf{m}_S \parallel \mathbf{S}$, non si ha necessariamente che \mathbf{m}_J sia \parallel a \mathbf{J} .

Questo è comprensibile, ricordando che

$$\mathbf{m}_S = -\frac{e}{m} \mathbf{S} = -2 \frac{\mu_B}{\hbar} \mathbf{S}$$
$$\mathbf{m}_L = -\frac{e}{2m} \mathbf{L} = -\frac{\mu_B}{\hbar} \mathbf{L}$$