Università degli Studi di Perugia - Corso di Laurea Triennale in Fisica

Corso di

MECCANICA QUANTISTICA

Regole di Wilson-Sommerfeld per l'atomo idrogenoide

Dall'espressione del vettore posizione in coordinate sferiche

$$\vec{r} = (r \sin\theta \, \cos\varphi, r \sin\theta \, \sin\varphi, r\cos\theta)$$

segue

$$\frac{\partial \vec{r}}{\partial r} = \hat{e}_r \ , \qquad \frac{\partial \vec{r}}{\partial \theta} = r \, \hat{e}_\theta \ , \qquad \frac{\partial \vec{r}}{\partial \varphi} = r \sin\theta \, \hat{e}_\varphi \ ,$$

dove $\hat{e}_r, \hat{e}_\theta, \hat{e}_\varphi$ sono i versori delle linee coordinate dati da

$$\begin{aligned} \hat{e}_r &= (\sin\theta \, \cos\varphi, \sin\theta \, \sin\varphi, \cos\theta) \\ \hat{e}_\theta &= (\cos\theta \, \cos\varphi, \cos\theta \, \sin\varphi, -\sin\theta) \\ \hat{e}_\varphi &= (-\sin\varphi, \cos\varphi, 0) \ , \end{aligned}$$

con le proprietà di essere ortogonali fra loro e formare una terna sinistrorsa (right-handed).

$$\hat{e}_r \times \hat{e}_\theta = \hat{e}_\varphi \ , \qquad \hat{e}_\theta \times \hat{e}_\varphi = \hat{e}_r \ , \qquad \hat{e}_\varphi \times \hat{e}_r = \hat{e}_\theta \ .$$

La velocità di una particella in queste coordinate è data da

$$\vec{v} = \frac{d\vec{r}}{dt} = \dot{r}\frac{\partial \vec{r}}{\partial r} + \dot{\theta}\frac{\partial \vec{r}}{\partial \theta} + \dot{\varphi}\frac{\partial \vec{r}}{\partial \varphi} = \dot{r} \, \hat{e}_r + r\dot{\theta} \, \hat{e}_\theta + r\sin\theta\dot{\varphi} \, \hat{e}_\varphi \ .$$

La Lagrangiana del sistema è

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2}mv^2 + \frac{Ze^2}{r} = \frac{1}{2}m\left(\dot{r}^2 + r^2\dot{\theta}^2 + r^2\sin^2\theta\dot{\varphi}^2\right) + \frac{Ze^2}{r} \ ,$$

da cui si derivano i momenti canonici

$$p_r = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{r}} = m\dot{r} \ , \qquad p_\theta = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\theta}} = mr^2\dot{\theta} \ , \qquad p_\varphi = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\varphi}} = mr^2\sin^2\theta\dot{\varphi} \ .$$

Il momento angolare è dato da

$$\begin{aligned} \vec{L} &= m\vec{r} \times \vec{v} = mr\hat{e}_r \times \left(\dot{r} \, \hat{e}_r + r\dot{\theta} \, \hat{e}_\theta + r\sin\theta\dot{\varphi} \, \hat{e}_\varphi\right) \\ &= mr^2\left(\dot{\theta} \, \hat{e}_\varphi - \sin\theta\dot{\varphi} \, \hat{e}_\theta\right) = p_\theta\hat{e}_\varphi - \frac{p_\varphi}{\sin\theta}\hat{e}_\theta \ , \end{aligned}$$

e le sue componenti sono

$$\begin{aligned} L_x &= mr^2\left(-\sin\varphi\dot{\theta} - \sin\theta\cos\theta\cos\varphi\dot{\varphi}\right) = -\sin\varphi p_\theta - \cot\theta\cos\varphi p_\varphi \ , \\ L_y &= mr^2\left(\cos\varphi\dot{\theta} - \sin\theta\cos\theta\sin\varphi\dot{\varphi}\right) = \cos\varphi p_\theta - \cot\theta\sin\varphi p_\varphi \ , \\ L_z &= mr^2\sin^2\theta\dot{\varphi} = p_\varphi \ . \end{aligned}$$

Il quadrato del momento angolare è

$$L^2 = m^2 r^4 \left(\dot{\theta}^2 + \sin^2\theta \dot{\varphi}^2\right) = p_\theta^2 + \frac{p_\varphi^2}{\sin^2\theta} = p_\theta^2 + \frac{L_z^2}{\sin^2\theta} \ .$$

L'Hamiltoniana è

$$H = \frac{1}{2m}\left(p_r^2 + \frac{p_\theta^2}{r^2} + \frac{p_\varphi^2}{r^2\sin^2\theta}\right) - \frac{Ze^2}{r} = \frac{1}{2m}\left(p_r^2 + \frac{L^2}{r^2}\right) - \frac{Ze^2}{r} \ .$$

Regole di Wilson-Sommerfeld

$$I_r = \frac{1}{2\pi}\oint p_r\, dr = n_r \hbar \ , \tag{1}$$

$$I_\theta = \frac{1}{2\pi}\oint p_\theta\, d\theta = n_\theta \hbar \ , \tag{2}$$

$$I_\varphi = \frac{1}{2\pi}\oint p_\varphi\, d\varphi = n_\varphi \hbar \ . \tag{3}$$

Dalla (3) si ha

$$I_\varphi = |L_z| = n_\varphi \hbar \ .$$

Per risolvere la (2) si noti che

$$m r^2 \dot{\theta} = p_\theta = \pm\sqrt{L^2 - \frac{L_z^2}{\sin^2\theta}} \ ,$$

il segno superiore vale quando θ è crescente, il segno inferiore quando θ è decrescente. Il massimo e il minimo di θ si ricavano annullando il radicando, ossia quando $\sin\theta = \frac{|L_z|}{L}$. Quindi $\theta_{\min} \equiv \theta_1 = \arcsin\left(\frac{|L_z|}{L}\right)$ e $\theta_{\max} \equiv \theta_2 = \pi - \arcsin\left(\frac{|L_z|}{L}\right)$, avendo scelto la determinazione principale dell'arcoseno come: $-\pi/2 \leq \arcsin x \leq \pi/2$. Si noti che abbiamo $\cos\theta_1 = \sqrt{1 - \frac{L_z^2}{L^2}}$ e $\cos\theta_2 = -\sqrt{1 - \frac{L_z^2}{L^2}}$. Quindi

$$\begin{aligned}
I_\theta &= \frac{1}{2\pi}\oint p_\theta\, d\theta = \\
&= \frac{1}{2\pi}\left(\int_{\theta_1}^{\theta_2}\sqrt{L^2 - \frac{L_z^2}{\sin^2\theta}}\, d\theta - \int_{\theta_2}^{\theta_1}\sqrt{L^2 - \frac{L_z^2}{\sin^2\theta}}\, d\theta\right) \\
&= \frac{1}{\pi}\int_{\theta_1}^{\theta_2}\sqrt{L^2 - \frac{L_z^2}{\sin^2\theta}}\, d\theta = \frac{1}{\pi}\int_{\theta_1}^{\theta_2}\frac{\sqrt{L^2\sin^2\theta - L_z^2}}{\sin^2\theta}\sin\theta\, d\theta \\
&= \frac{L}{\pi}\int_{-\alpha}^{\alpha}\frac{\sqrt{\alpha^2 - x^2}}{1 - x^2}\, dx \ ,
\end{aligned}$$

avendo posto

$$\alpha = \sqrt{1 - \frac{L_z^2}{L^2}} \ , \qquad \text{e} \qquad x = \cos\theta \ .$$

Continuando

$$\begin{aligned}
I_\theta &= \frac{2L}{\pi}\int_0^{\alpha}\frac{\sqrt{\alpha^2 - x^2}}{1 - x^2}\, d\theta = \frac{2L}{\pi}\left[-\sqrt{1-\alpha^2}\arctan\left(\frac{x\sqrt{1-\alpha^2}}{\sqrt{\alpha^2 - x^2}}\right) + \arcsin\left(\frac{x}{\alpha}\right)\right]_0^{\alpha} \\
&= L\left(-\sqrt{1-\alpha^2} + 1\right) = L\left(-\frac{|L_z|}{L} + 1\right) = L - |L_z| = n_\theta \hbar \ .
\end{aligned}$$

Quindi il modulo del momento angolare è quantizzato

$$L = (n_\theta + n_\varphi)\hbar \equiv \ell\hbar \ ,$$

inoltre $n_\varphi \le \ell$ poiché $n_\theta \ge 0$. Se si pone $n_\varphi \equiv |m|$ si ha $L = \ell\hbar$ e $L_z = m\hbar$, $\ell = 0, 1, 2, \ldots$ e $|m| \le \ell$.

Per quanto riguarda la prima delle tre regole, la (1), da

$$H = \frac{1}{2m}\left(p_r^2 + \frac{L^2}{r^2}\right) - \frac{Ze^2}{r} = -|E| \ .$$

segue

$$p_r^2 = m^2\dot{r}^2 = 2m\left(-|E| + \frac{Ze^2}{r} - \frac{L^2}{2mr^2}\right) = \frac{2m|E|}{r^2}(r_2 - r)(r - r_1) \ .$$

Il perielio r_1 e l'afelio r_2 sono i punti in cui $\dot{r} = 0$ ($r_1 \le r \le r_2$) e sono dati da

$$r_{2,1} = \frac{1}{2|E|}\left[Ze^2 \pm \sqrt{Z^2e^4 - \frac{2|E|L^2}{m}}\right] \ , \qquad r_1 + r_2 = \frac{Ze^2}{|E|} \ , \qquad r_1 r_2 = \frac{L^2}{2m|E|} \ .$$

Quindi abbiamo

$$\begin{aligned}
I_r &= \frac{1}{2\pi}\oint p_r\, dr = \frac{1}{\pi}\int_{r_1}^{r_2} p_r\, dr = \frac{1}{\pi}\sqrt{2m|E|}\int_{r_1}^{r_2} \frac{\sqrt{(r_2 - r)(r - r_1)}}{r} \\
&= \frac{1}{\pi}\sqrt{2m|E|}\left[\sqrt{(r_2 - r)(r - r_1)} - \frac{r_1 + r_2}{2}\arcsin\left(\frac{r_1 + r_2 - 2r}{r_2 - r_1}\right) - \sqrt{r_1 r_2}\arcsin\left(\frac{(r_1 + r_2)r - 2r_1 r_2}{r(r_2 - r_1)}\right)\right]_{r_1}^{r_2} \\
&= \sqrt{2m|E|}\left(\frac{r_1 + r_2}{2} - \sqrt{r_1 r_2}\right) = \sqrt{2m|E|}\left(\frac{Ze^2}{2|E|} - \frac{L}{\sqrt{2m|E|}}\right) = Ze^2\sqrt{\frac{m}{2|E|}} - L \\
&= Ze^2\sqrt{\frac{m}{2|E|}} - \ell\hbar = n_r\hbar \ ,
\end{aligned}$$

da cui

$$E = -|E| = -\frac{mZ^2e^4}{2\hbar^2 n^2} \ , \qquad n = n_r + \ell = n_r + n_\theta + n_\varphi \ .$$

Poichè $|E| \le \frac{mZ^2e^4}{2L^2}$ segue che $I_r \ge 0$ e quindi $n_r \ge 0$. Tuttavia se $\ell = 0$ deve essere $n_r \ne 0$, altrimenti $|E| = \mathrm{cost}/0$. Quindi $n = 1, 2, 3, \ldots$.